

На правах рукописи

МИРОНОВ ГЕННАДИЙ ИВАНОВИЧ

ТЕОРИЯ ДВУМЕРНЫХ И НАНОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМ  
С СИЛЬНЫМИ КОРРЕЛЯЦИЯМИ В МОДЕЛИ ХАББАРДА

01.04.02 – теоретическая физика

А в т о р е ф е р а т  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Казань – 2008

Работа выполнена на кафедре теоретической физики ГОУ ВПО "Казанский  
государственный университет им. В.И. Ульянова-Ленина"

Научный консультант: доктор физико-математических наук,  
профессор Кочелаев Борис Иванович

Официальные оппоненты: академик РАН, доктор физико-  
математических наук, профессор  
Изюмов Юрий Александрович  
  
доктор физико-математических наук,  
профессор Рудой Юрий Григорьевич  
  
доктор физико-математических наук,  
профессор Тейтельбаум  
Георгий Бенционович

Ведущая организация: Московский государственный университет  
им М.В. Ломоносова, Москва

Защита состоится "22" мая 2008 года в 14<sup>30</sup> часов на заседании  
диссертационного совета Д.212.081.15 при Казанском государственном  
университете им. В.И. Ульянова-Ленина по адресу: г. Казань, ул. Кремлевская,  
18

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке  
им. Н.И. Лобачевского Казанского государственного университета.

Автореферат разослан " \_\_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2008 года.

Ученый секретарь  
специализированного совета,  
доктор физ.-мат. наук, профессор



Еремин М.В.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ.

**Актуальность проблемы.** Вскоре после открытия высокотемпературной сверхпроводимости в 1987 году было высказано предположение [1], что явление высокотемпературной сверхпроводимости, необычные свойства сверхпроводников как в нормальном, так и сверхпроводящем состояниях можно объяснить в рамках модели Хаббарда [2]. Поэтому в последнее время теоретическому исследованию модели Хаббарда уделяется большое внимание.

В модели Хаббарда атом заменяется единственным электроном (электронным уровнем). Если уровень пуст (на атоме нет электрона), то энергия равна нулю; если на уровне находится один электрон с произвольным направлением спина, то энергия равна  $\varepsilon$ ; если на уровне имеются два электрона, то энергия равна  $2\varepsilon + U$ . Добавочная положительная энергия  $U$  описывает внутриатомное кулоновское отталкивание двух локализованных на узле электронов.

Хаббард предложил наиболее существенную часть, связанную с кулоновским отталкиванием электронов, рассматривать в качестве нулевого приближения, в то время как кинетическую часть электронного перескока в соседнюю ячейку считать возмущением. В результате такого подхода Хаббарду удалось решить одну из главных проблем физики твердого тела, определить условия, при которых происходит переход из диэлектрического состояния в металлическое состояние [3].

Модель Хаббарда изучается с использованием различных методик. Поскольку практически все методы основаны на разного рода расщеплениях, разложениях по теории возмущений, то особую важность для определения степени достоверности предлагаемых приближенных решений имеют точные результаты. В модели Хаббарда получены следующие точные результаты:

- 1) Имеется точное решение модели Хаббарда в атомном пределе.
- 2) Для одномерной модели Хаббарда при  $T=0$  есть точное решение, которое получили Либ и Ву [4] на основе анзаца Бете. На основе этого решения можно заключить, что при точно наполовину заполненной зоне

основным состоянием является диэлектрическое, антиферромагнитное состояние.

3) В [5] результаты точного решения Либа и Ву [4] обобщены на случай  $T \neq 0$ . Здесь показано, что в случае одномерной модели Хаббарда при  $U \rightarrow \infty$  ( $U$  – энергия кулоновского отталкивания электронов на одном узле кристаллической решетки) намагниченность ведет себя подобно системе свободных спинов ( $S=1/2$ ).

**Целью данной диссертационной работы является** построение метода решения модели Хаббарда, позволяющего исследовать эту модель в пределах контролируемых погрешностей в области как сильных, так и промежуточных и слабых корреляций:

- вычислить функции Грина, характеризующие свойства двухмерной бипартитной модели Хаббарда в рамках выбранного приближения;
- определить термодинамические средние – корреляционные функции, позволяющие исследовать свойства модели Хаббарда как при конечных значениях температур, так и при температуре  $T = 0$ ;
- определить основное состояние двухмерной модели Хаббарда, вычислить энергию этого состояния;
- определить энергетический спектр двухмерной модели Хаббарда с учетом перескока электронов на второй по близости соседний узел кристаллической решетки;
- вычислить и исследовать магнитную восприимчивость системы, характеризующейся гамильтонианом Хаббарда;
- понять особенности свойств наносистем, которые можно описывать в рамках модели Хаббарда;
- вычислить энергетический спектр и энергию основного состояния фуллерена  $C_{60}$  и структурных элементов фуллерена, таких как пентагон и гексагон, понять, как спектр элементарных возбуждений влияет на свойства наносистем.

**Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:**

- разработать методику решения операторных уравнений, описывающих эволюцию квантовой системы, описываемой гамильтонианом Хаббарда, в рамках "приближения статических флуктуаций";
- произвести вычисление фурье-образа антикоммутаторной функции Грина, полюса которой определяют энергетический спектр исследуемой модели;
- получить выражения для корреляционных функций (термодинамических средних), описывающих свойства модели Хаббарда;
- получить в приближении статических флуктуаций замкнутую систему операторных уравнений, описывающих поведение наносистемы в рамках модели Хаббарда, решить эту систему уравнений;
- сравнить полученные решения с точными решениями модели Хаббарда.

**Методы проведенного исследования:**

Круг вопросов, обсуждающихся в диссертационной работе, касается исследования свойств бипартитной двухмерной модели Хаббарда и свойств различных наносистем в рамках модели Хаббарда. Выше мы отметили, что существует множество методик решения модели Хаббарда, они рассмотрены в первой главы настоящей работы.

Одной из основных задач современной физики конденсированных сред является вычисление корреляционных функций изучаемых систем, поскольку они содержат в себе всю фактическую информацию о свойствах исследуемых систем. Поэтому разработка аналитических методов вычисления корреляционных функций, а также функций Грина представляет собой актуальную задачу теоретической физики.

В настоящее время существует несколько способов вычисления корреляционных функций и термодинамических характеристик одномерных и двухмерных моделей, среди которых можно выделить методы разного рода расщеплений, например, Хаббард [2] применил технику расщепления двухвременных функций Грина [6], метод трансфер-матриц [7], диаграммные

методы [3], методы теорий возмущения [8], а также методы, основанные на уравнениях движения [9].

Метод уравнения движения при всех своих преимуществах [9], обладает принципиальным недостатком – в его рамках нет систематического способа расщепления (обрыва) обычно бесконечной цепи уравнений движения для функций Грина, и, следовательно, нет внутреннего способа оценки точности выполняемого расщепления.

В работе [10] при исследовании модели Гейзенберга был предложен метод расщепления уравнений для функций Грина, названный статическим флуктуационным приближением. Суть этого метода заключается в том, что для расщепления уравнений движения некий оператор  $\hat{\sigma}_f(t) = \hat{\sigma}_f$  в представлении Гейзенберга по аналогии с [11] разбивается на две части [10]:

$$\hat{\sigma}_f = \langle \hat{\sigma}_f \rangle + \Delta \hat{\sigma}_f$$

где  $\Delta \hat{\sigma}_f$  - оператор флуктуации, зависящий от времени. Смысл статического флуктуационного приближения в [10] заключается в том, что оператор  $\Delta \hat{\sigma}_f$  объявляется независимым от времени, причем

$$(\Delta \hat{\sigma}_f)^2 \cong \langle (\Delta \hat{\sigma}_f)^2 \rangle -$$

квадрат оператора флуктуации заменяется на среднее значение ( $C$  – число), что и позволяет замкнуть систему уравнений движения [10].

Разработанная в диссертационной работе методика является развитием метода статического флуктуационного приближения применительно к модели Хаббарда. Исходя из внутренних свойств модели Хаббарда, удалось:

- совершив некоторое каноническое преобразование избавиться от зависимости оператора флуктуации от времени, так что без всякого приближения оператор флуктуации становится статическим, что позволило решить искомые системы уравнений для операторов;

- обосновать, используя оператор флуктуации числа частиц, возможность замены квадрата оператора флуктуации числа частиц на среднее значение этого оператора,
- показать, взяв оператор флуктуации проекции спина на ось OZ, что квадрат оператора флуктуации выражается в модели Хаббарда через с-число и оператор флуктуации проекции спина в первой степени, что позволяет получить точные уравнения движения для операторов вторичного квантования в замкнутом виде.

Таким образом, в отличие от обычных схем расщепления в диссертационной работе предлагается схема, позволяющая получить замкнутые уравнения движения для операторов в представлении Гейзенберга либо в рамках контролируемых приближений, либо в точном виде.

### **Научная новизна:**

1. Разработана методика решения двухмерной бипартитной модели Хаббарда в рамках приближения статических флуктуаций. В приближении статических флуктуаций было получено решение для оператора рождения частиц в представлении Гейзенберга, в котором заключена вся информация о физических свойствах модели Хаббарда в рамках выбранного приближения.

2. В приближении статических флуктуаций были вычислены и исследованы одночастичные функции Грина, которые свидетельствуют о том, что линейная цепочка атомов в модели Хаббарда описывается в рамках латтинжеровской жидкости, что согласуется с точным решением [4], тогда как двухмерная модель Хаббарда в случае сильных корреляций вблизи границы зоны Бриллюэна приобретает черты нефермижидкостной системы, но не может быть сведена к латтинжеровской жидкости, а в случае слабых корреляций описывается в рамках нормальной ферми-жидкости.

3. В рамках выбранного приближения был вычислен и исследован энергетический спектр двухмерной бипартитной модели Хаббарда, показано, что в режиме сильных корреляций энергетический спектр имеет вид, характерный для случая антиферромагнитного упорядочения в системе. Полученные энергетические спектры позволяют естественным образом

объяснить переход металл-диэлектрик при изменении параметров системы (изменения концентрации электронов, соотношения между интегралом переноса и кулоновским интегралом).

4. Было получено самосогласованное уравнение для определения величины проекции спина  $S$  на ось  $OZ$ , решение которого показывает, что в случае сильных корреляций проекция спина  $S = 1/2$ .

5. В приближении статических флуктуаций была вычислена энергия основного состояния для бипартитной двухмерной модели Хаббарда, показано, что учет перехода электронов на следующий по близости соседний узел кристаллической решетки, играет важную роль. В случае одномерной модели Хаббарда в пределах  $U=0$  и  $U=\infty$  энергии основного состояния в приближении статических флуктуаций и в случае точного решения [4] совпадают, в области промежуточных значений  $U$  имеется хорошее согласие с точным решением одномерной модели Хаббарда [4].

6. С использованием разработанной методики вычисления функций Грина была вычислена магнитная восприимчивость двумерной двухподрешеточной модели Хаббарда. Сравнение полученных результатов, с точным решением одномерной модели Хаббарда в магнитном поле [12] выявило, что в частном случае одномерной модели Хаббарда в присутствии магнитного поля приближение статических флуктуаций и точное решение показывают почти совпадающие как качественно, так и количественно (с точностью до постоянного множителя) результаты.

7. В приближении статических флуктуаций вычислены и исследованы характеристики наносистем, показано, что модель Хаббарда можно использовать при исследовании наносистем.

#### **Актуальность темы:**

Актуальность темы определяется тем, что в меднооксидных высокотемпературных сверхпроводниках имеет место ситуация  $U \geq B$ , вследствие чего немедленно были предприняты многочисленные попытки привлечь для их описания модель Хаббарда. Учитывая важную роль



электронных состояний  $\text{CuO}_2$ -слоев и квазидвухмерный характер электронного спектра, следовало обратить особое внимание на свойства двумерной модели Хаббарда. Статистическая механика модели Хаббарда в двух измерениях представляет очень сложную и мало исследованную задачу. Кроме того, в последнее время активно развиваются атомная инженерия, нанотехнология, что приводит к необходимости теоретического исследования свойств различных наноструктур, исследование наноструктур составляет важный раздел как физики твердого тела, так и материаловедения. Поэтому тема диссертационной работы является весьма актуальной.

### **Практическая и научная ценность:**

Развитая автором диссертационной работы методика расчета характеристик модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций позволяет исследовать свойства модели Хаббарда в режимах как сильной связи, так и слабой и промежуточной связей. Вычисление энергии основного состояния в приближении статических флуктуаций показало, что в частном случае одномерной модели Хаббарда решение в приближении статических флуктуаций и точное решение [4] совпадают как качественно, так и количественно: незначительное различие значений энергий в случае промежуточной связи объясняется переоценкой роли кулоновского отталкивания. Если в случае одномерной модели Хаббарда показано [4], что основным состоянием является антиферромагнитное состояние, причем перехода Мотта по параметру  $U$  нет, то исследование двумерной модели Хаббарда показало, что основным состоянием является антиферромагнитное состояние, возможен переход Мота по параметру  $U$ , о чем свидетельствует исследование нормального состояния купратов [8].

Приближение статических флуктуаций позволяет исследовать свойства наносистем в рамках модели Хаббарда. Эти исследования показывают, что наносистемы обладают особенностями, которые не характерны для массивных образцов. В частности, эти особенности касаются спектра элементарных возбуждений и свойств, связанных со спектром, а также значений магнитных

моментов атомов наносистем. Эксперименты показали, что величина проекции спина (магнитного момента) атома зависит от количества атомов в наносистеме: чем больше число атомов в нанокластере, тем магнитный момент атома по величине меньше [13]. Исследование поведения нанокластеров с учетом влияния атомов подложки на свойства атомов наносистемы позволяет объяснить наблюдаемое явление уменьшения величины магнитного момента (спина) при увеличении числа узлов в наносистеме. Из результатов вычислений следует, что возможно «управление» значением проекции спина исследуемого атома путем изменения температуры, потенциала кулоновского поля.

### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Разработка метода решения модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций, реализация этого метода при исследовании двухмерной бипартитной модели Хаббарда и наносистем.
2. Результаты вычисления энергетического спектра двухмерной бипартитной модели Хаббарда и различных наносистем, вычисления и исследования одночастичных функций Грина в рамках приближения статических флуктуаций.
3. Результаты по вычислению энергии основного состояния двухмерной двухподрешеточной модели Хаббарда, а также наносистем в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций, исследования влияния интегралов переноса на второй по близости узел кристаллической решетки на поведение энергии основного состояния.
4. Результаты по вычислению и исследованию магнитной восприимчивости двухмерной бипартитной модели Хаббарда, учитывающей восприимчивости спиновых подсистем и переносы намагниченности от одной спиновой подсистемы к другой.
5. Результаты вычисления магнитного момента (спина) атомов наносистем.

**Достоверность результатов** обеспечивается надежностью используемых методов расчета, результаты вычислений сравниваются с известными точными

решениями. Например, вычисление энергии основного состояния одномерной модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций показало, что приближенное решение и точное решение [4] в режимах сильной связи и слабой связи практически совпадают, в области промежуточной связи энергия основного состояния при приближенном решении оказывается выше энергии основного состояния в случае точного решения на несколько процентов. Вычисление статической восприимчивости одномерной модели Хаббарда показало, что приближенное и точное решения совпадают как качественно, так и количественно (с точностью до постоянного множителя). Точное и приближенное решения димера показали, что одночастичные функции Грина в случае точного решения и решения в приближении статических флуктуаций совпадают. Выражения для функций Грина в случае точного решения и решения в приближении статических флуктуаций совпали и при учете кулоновского отталкивания электронов, находящихся на соседних узлах наносистемы.

**Личный вклад соискателя** состоял в постановке задач, выполнении теоретических расчетов и оценок, анализе и интерпретации результатов. Соавторы исследований участвовали в выработке некоторых подходов при решении некоторых задач, обсуждении результатов и в некоторых случаях при проведении компьютерных расчетов.

**Апробация работы:** Основные результаты диссертационной работы докладывались на IV Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" (Йошкар-Ола-Казань-Москва, 1997); 27<sup>th</sup> Congress AMPERE on Magnetic Resonance and Related Phenomena (Kazan, 1994); Международной научной конференции "Дифференциальные уравнения. Интегральные уравнения. Специальные функции" (Самара, 1997); 3 Сибирском Конгрессе по прикладной и индустриальной математике (Новосибирск, 1998); V Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" (Йошкар-Ола-Казань-Москва, 1998); Молодежной научной школе "Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений" (Казань, 1998); X

Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" (Йошкар-Ола-Казань-Москва, 2003); XXX Международной зимней школе физиков-теоретиков "Коуровка-2004" (Екатеринбург-Челябинск, 2004); International Conference "Nanores-2004" (Kazan, 2004); XI Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" (Йошкар-Ола-Казань-Москва, 2004); XII Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" (Йошкар-Ола-Казань-Москва, 2005); XXXI Международной зимней школе физиков-теоретиков "Коуровка-2006" (Екатеринбург-Челябинск, 2006); XIII Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" (Йошкар-Ола-Казань-Москва, 2006); International Symposium "Nuclear Magnetic Resonance in Condensed Matter" (Saint Petersburg, 2006), итоговых научных конференциях Казанского государственного университета, Марийского государственного педагогического института.

**Публикации:** Результаты работы опубликованы в 36 статьях (17 из них в рецензируемых сборниках), а также в 25 тезисах конференций.

**Структура диссертации:** Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения и списка использованной литературы. Работа изложена на 242 страницах, содержит 42 рисунка.

Во введении обоснована актуальность темы исследования, сформулирована цель работы, осуществлена постановка основных задач, изложены основные результаты и защищаемые положения, их новизна и практическая значимость, структура и содержание диссертации.

В первой главе "**Краткий обзор работ по модели Хаббарда и по исследованию наноструктур**" проведен обзор работ по модели Хаббарда, рассмотрены физические основы модели Хаббарда. Проанализированы работы по исследованию модели Хаббарда в рамках различных приближений. Рассмотрены решения модели Хаббарда, демонстрирующие возможности антиферромагнитного упорядочения в модели Хаббарда. Рассмотрено и проанализировано точное решение одномерной модели Хаббарда. В связи с

ВТСП рассмотрена проблема модели Хаббарда в двух измерениях. В связи с задачами, поставленными нанотехнологией, рассмотрены наноструктуры, методы исследования наносистем и возможности применения модели Хаббарда для наноструктур.

Во второй главе "**Антиферромагнетизм в двухмерной модели Хаббарда**" диссертации разработана методика решения модели Хаббарда в рамках приближения статических флуктуаций, проведено исследование модели Хаббарда в рамках выбранного приближения.

Гамильтониан Хаббарда [2] обобщим следующим образом на случай двух подрешеток **A** и **C**:

$$H = H_0 + V, \quad (1.1)$$

$$H_0 = \sum_{\sigma, f \in A} \varepsilon_1 n_{f\sigma} + \sum_{\sigma, l \in C} \varepsilon_2 n_{l\sigma} + \sum_{\sigma, f, l} B_{fl} (a_{f\sigma}^+ a_{l\sigma} + a_{l\sigma}^+ a_{f\sigma}), \quad (1.2)$$

$$V = \frac{U_1}{2} \sum_{\sigma, f \in A} n_{f\sigma} n_{f\bar{\sigma}} + \frac{U_2}{2} \sum_{\sigma, l \in C} n_{l\sigma} n_{l\bar{\sigma}}, \quad (1.3)$$

Уравнения движения для операторов рождения частиц в представлении Гейзенберга ( $j=f, l$ )

$$a_{j\sigma}^+(\tau) = \exp(H\tau) a_{j\sigma}^+(0) \exp(-H\tau), (\tau = it)$$

имеют вид:

$$\frac{d}{d\tau} a_{f\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1 a_{f\sigma}^+(\tau) + \sum_l B_{fl} a_{l\sigma}^+(\tau) + U_1 n_{f\bar{\sigma}} a_{f\sigma}^+(\tau), \quad (1.4)$$

$$\frac{d}{d\tau} a_{l\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2 a_{l\sigma}^+(\tau) + \sum_f B_{fl} a_{f\sigma}^+(\tau) + U_2 n_{l\bar{\sigma}} a_{l\sigma}^+(\tau). \quad (1.5)$$

Операторы  $n_{j\bar{\sigma}}$  в (1.4), (1.5) представим следующим образом ( $j = f, l$ )

$$n_{j\bar{\sigma}} = \langle n_{j\bar{\sigma}} \rangle + \Delta n_{j\bar{\sigma}}, \quad (1.6)$$

Выразим спин  $S$  и концентрацию электронов  $n$ :

$$\langle n_{f\sigma} \rangle + \langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle = n, \quad (1.7)$$

$$\langle n_{f\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{f\sigma} \rangle = 2 \langle S_f^z \rangle = 2S. \quad (1.8)$$

С учетом (1.7), (1.8) уравнение, например, (1.4), перепишем в виде

$$\frac{d}{d\tau} a_{f\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1' a_{f\sigma}^+(\tau) + \sum_l B_{fl} a_{l\sigma}^+(\tau) + U_1 \Delta n_{f\bar{\sigma}} a_{f\sigma}^+(\tau), \quad (1.9)$$

где  $\varepsilon_1' = \varepsilon_2 + (U_1/2) + SU_1$ ,  $\varepsilon_2' = \varepsilon_2 + (U_2/2) - SU_2$  - для другой подсистемы.

Введем представление "типа представления взаимодействия":

$$a_{j\sigma}^+(\tau) = \exp(H_0\tau) \tilde{a}_{j\sigma}^+(\tau) \exp(-H_0\tau) \quad (1.10)$$

где  $H_0$  - гамильтониан, входящий в (1.1) с учетом перенормировок собственных энергий электронов (замен  $\varepsilon_1 \rightarrow \varepsilon_1'$ ,  $\varepsilon_2 \rightarrow \varepsilon_2'$ ), оператор  $\tilde{a}_{j\sigma}^+(\tau)$ :

$$\tilde{a}_{j\sigma}^+(\tau) = \exp(-H_0\tau) \exp(H\tau) a_{j\sigma}^+(0) \exp(H\tau) \exp(H_0\tau). \quad (1.11)$$

В этом случае имеем следующее уравнения для неизвестного оператора

$$\frac{d}{d\tau} \tilde{a}_{j\sigma}^+(\tau) = U_1 \Delta \tilde{n}_{j\bar{\sigma}} \tilde{a}_{j\sigma}^+(\tau), \quad (1.12)$$

где  $\Delta \tilde{n}_{j\bar{\sigma}}(\tau) = \exp(-H_0\tau) \Delta n_{j\bar{\sigma}}(\tau) \exp(H_0\tau)$ . Уравнение движения для оператора  $\Delta \tilde{n}_{j\bar{\sigma}}(\tau)$  имеет вид

$$\frac{d}{d\tau} \Delta \tilde{n}_{j\bar{\sigma}} = 0. \quad (1.13)$$

Таким образом, физическая величина, соответствующая оператору  $\Delta \tilde{n}_{j\bar{\sigma}}(\tau)$ , является интегралом движения:  $\Delta \tilde{n}_{j\bar{\sigma}}(\tau) = \Delta n_{j\bar{\sigma}}(0)$ . Для того, чтобы получить замкнутую систему дифференциальных уравнений, получим уравнение движения для оператора  $\Delta \tilde{n}_{j\bar{\sigma}} \tilde{a}_{j\sigma}^+(\tau)$ , и учтем, что оператор  $\Delta n_{f\bar{\sigma}}^2$  в случае половинного заполнения является С-числом:

$$\Delta n_{f\bar{\sigma}}^2 = \langle \Delta n_{f\bar{\sigma}}^2 \rangle, \quad (1.14)$$

В этом случае получим:

$$\frac{d}{d\tau} \Delta n_{f\bar{\sigma}} \tilde{a}_{f\bar{\sigma}}^{\pm}(\tau) = U_1 \langle \Delta n_{f\bar{\sigma}}^2 \rangle \tilde{a}_{f\bar{\sigma}}^{\pm}(\tau), \quad (1.15)$$

С учетом (1.6), и свойства операторов  $n_{j\sigma}^2 = n_{j\sigma}$ , можно получить

$$\Phi^2 \langle \Delta n_{f\bar{\sigma}}^2 \rangle = \langle \Delta n_{l\bar{\sigma}}^2 \rangle (1/4) - S^2. \quad (1.16)$$

Решения системы уравнений (1.12), (1.15) имеют вид ( $\tilde{a}_{f\sigma}^+(0) = a_{f\sigma}^+(0)$ )

$$\tilde{a}_{f\sigma}^+(\tau) = a_{f\sigma}^+(0) \cosh(U_1 \Phi \tau) + \Delta n_{f\bar{\sigma}} a_{f\sigma}^+(0) \sinh(U_1 \Phi \tau) / \Phi, \quad (1.17)$$

Тогда общее решение для подрешетки **A** имеет вид

$$\begin{aligned} a_{f\sigma}^+(\tau) = & \exp(H_0 \tau) a_{f\sigma}^+(0) \exp(-H_0 \tau) \cosh(U_1 \Phi \tau) + \\ & + \Delta n_{f\bar{\sigma}} \exp(H_0 \tau) a_{f\sigma}^+(0) \exp(-H_0 \tau) \sinh(U_1 \Phi \tau) / \Phi \end{aligned} \quad (1.18)$$

Вычислим  $\bar{a}_{f\sigma}^+(\tau) = \exp(H_0 \tau) a_{f\sigma}^+(0) \exp(-H_0 \tau)$ . Оператор  $\bar{a}_{f\sigma}^+(\tau)$

подчиняется уравнению

$$\frac{d}{d\tau} \bar{a}_{f\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1' \bar{a}_{f\sigma}^+(\tau) + \sum_l B_{fl} \bar{a}_{l\sigma}^+(\tau). \quad (1.19)$$

Аналогично для частиц другой подрешетки

$$\frac{d}{d\tau} \bar{a}_{l\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2' \bar{a}_{l\sigma}^+(\tau) + \sum_f B_{fl} \bar{a}_{f\sigma}^+(\tau). \quad (1.20)$$

После преобразования Фурье:

$$a_{f\sigma}^+ = (2/N)^{1/2} \sum_k a_{k\sigma}^+ \exp(-ikr_f), \quad a_{l\sigma}^+ = (2/N)^{1/2} \sum_k b_{k\sigma}^+ \exp(-ikr_l)$$

из уравнений (1.19) и (1.20) получим

$$\frac{d}{d\tau} \bar{a}_{k\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_1' \bar{a}_{k\sigma}^+(\tau) + B_k \bar{b}_{k\sigma}^+(\tau), \quad (1.21)$$

$$\frac{d}{d\tau} \bar{b}_{k\sigma}^+(\tau) = \varepsilon_2' \bar{b}_{k\sigma}^+(\tau) + B_k \bar{a}_{k\sigma}^+(\tau), \quad (1.22)$$

где для  $B_k$  имеем ( $d = 2$ ):  $B_k = -2|B| [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$ .

Решения (1.21), (1.22) имеют вид

$$\bar{a}_{k\sigma}^+(\tau) = \left\{ a_{k\sigma}^+(0) \left[ \left( (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2) / 2t_k \right) sh(t_k \tau) + ch(t_k \tau) \right] + b_{k\sigma}^+(0) sh(t_k \tau) B_k / t_k \right\} \exp(\tau (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2) / 2), \quad (1.23)$$

$$\bar{b}_{k\sigma}^+(\tau) = \left\{ b_{k\sigma}^+(0) \left[ \left( (\varepsilon'_2 - \varepsilon'_1) / 2t_k \right) sh(t_k \tau) + ch(t_k \tau) \right] + a_{k\sigma}^+(0) sh(t_k \tau) B_k / t_k \right\} \exp(\tau (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2) / 2), \quad (1.24)$$

где

$$t_k = \left[ \left( (\varepsilon'_2 - \varepsilon'_1) / 2 \right)^2 + B_k^2 \right]^{1/2}, \quad \bar{a}_{k\sigma}^+(0) = a_{k\sigma}^+(0), \quad \bar{b}_{k\sigma}^+(0) = b_{k\sigma}^+(0).$$

Решение (1.18) с учетом (1.23), (1.24) после преобразования Фурье примет вид

$$\begin{aligned} a_{k\sigma}^+(\tau) = & \left\{ \left[ a_{k\sigma}^+(0) \left[ \left( (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2) / 2t_k \right) sh(t_k \tau) + ch(t_k \tau) \right] + b_{k\sigma}^+(0) sh(t_k \tau) B_k / t_k \right] ch(U_1 \Phi \tau) + \left[ \Delta n_{1\bar{\sigma}} a_{k\sigma}^+(0) \cdot \right. \right. \\ & \left. \left[ \left( (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2) / 2t_k \right) sh(t_k \tau) + ch(t_k \tau) \right] + \Delta n_{1\sigma} b_{k\sigma}^+(0) sh(t_k \tau) B_k / t_k \right] \cdot \\ & \left. sh(U_1 \Phi \tau) / \Phi \right\} \exp(\tau (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2) / 2) \end{aligned} \quad (1.25)$$

где  $\Delta n_{1\bar{\sigma}} = (2/N) \sum_p \left( n_{p\sigma} - \langle n_{p\sigma} \rangle \right).$

В (1.25) и в аналогичном выражении для электронов другой подсистемы заключена вся информация о физических свойствах модели Хаббарда в рамках выбранного приближения. Нас в первую очередь интересует энергетический спектр системы. С этой целью вычислим фурье-образы антикоммутирующих функций Грина для электронов разных подрешеток:

$$\begin{aligned} \langle \langle a_{k\sigma}^+ | a_{k\sigma} \rangle \rangle_E = & \frac{i}{2\pi} \frac{1}{4} \left\{ \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2) / 2t_k}{E - U_1 \Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2) / 2} + \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2) / 2t_k}{E + U_1 \Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2) / 2} + \right. \\ & \left. + \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2) / 2t_k}{E - U_1 \Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2) / 2} + \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2) / 2t_k}{E + U_1 \Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2) / 2} \right\}, \end{aligned} \quad (1.26)$$



$$\left\langle \left\langle b_{k\sigma}^+ \middle| b_{k\sigma} \right\rangle \right\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{4} \left\{ \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2)/2t_k}{E - U_2\Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2)/2} + \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2)/2t_k}{E + U_2\Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2)/2} + \right. \\ \left. + \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2)/2t_k}{E - U_2\Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2)/2} + \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2)/2t_k}{E + U_2\Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2)/2} \right\}. \quad (1.27)$$

где

$$\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2 = \varepsilon_{\mp} + \varepsilon_2 + ((U_1 + U_2)/2) + S(U_1 - U_2),$$

$$\varepsilon'_1 - \varepsilon'_2 = \varepsilon_{\mp} - \varepsilon_2 + ((U_1 - U_2)/2) + S(U_1 + U_2),$$

Полюса функций Грина (1.26), (1.27) определяют энергетический спектр системы

$$E_{1-4} = (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2)/2 \pm U_1\Phi \pm t_k, \quad (1.28)$$

$$E_{5-8} = (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_2)/2 \pm U_2\Phi \pm t_k. \quad (1.29)$$

Анализ спектра (1.28), (1.29) в случае наполовину заполненной зоны ( $n=1$ ) показывает, что при уменьшении температуры ниже температуры Нееля зоны, обусловленные антиферромагнитным взаимодействием, сужаются, и в результате, при  $T=0$  останутся две узкие зоны (рис. 1.1 - 1.3).

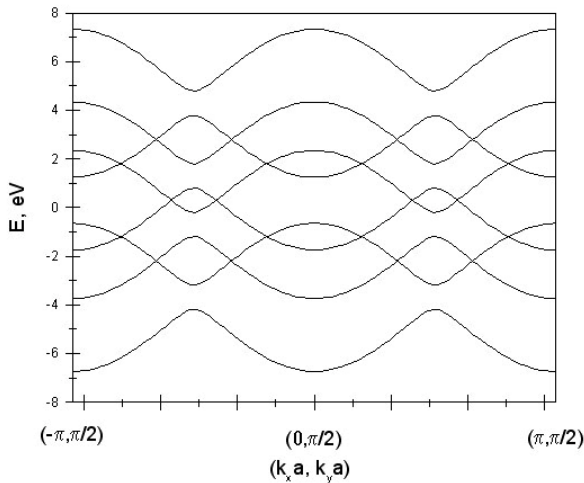


Рис. 1.1

Энергетический спектр модели Хаббарда при следующих значениях параметров:

$$\varepsilon_1 = -4 \text{ eV}, \quad \varepsilon_2 = -1 \text{ eV}, \quad U_1 = 8 \text{ eV}, \quad U_2 = 2 \text{ eV}, \\ B = 1.5 \text{ eV}, \quad S = 0.1.$$

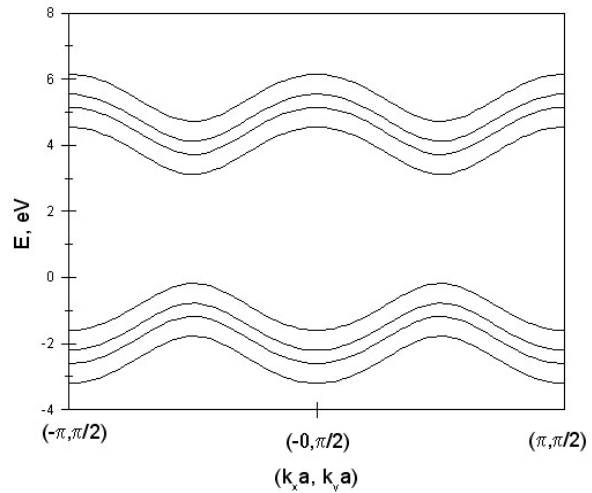


Рис. 1.2

Энергетический спектр модели Хаббарда при следующих значениях параметров:

$$\varepsilon_1 = -4 \text{ eV}, \quad \varepsilon_2 = -1 \text{ eV}, \quad U_1 = 8 \text{ eV}, \quad U_2 = 2 \text{ eV}, \\ B = 1.5 \text{ eV}, \quad S = 0.49.$$

Если положить  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \varepsilon$  и  $U_1 = U_2 = U$ , то можно перейти к простой модели Хаббарда. Спектр элементарных возбуждений в этом случае описывается более простой формулой ( $n=1$ ,  $S=1/2$ )

$$E(k) = \pm \left[ \left( U/2 \right)^2 + 4B^2 \left[ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) \right] \right]^{1/2}. \quad (1.30)$$

Полученная форма энергетического спектра (1.30) (рис. 1.4) характерна для антиферромагнитного диэлектрического состояния [14]. Действительно, анализ спектра в этом случае показывает, что при  $n=1$  энергия основного состояния в случае антиферромагнитного упорядочения будет меньше энергии основного состояния в случае парамагнетизма или ферромагнетизма. Следовательно, основное состояние модели Хаббарда в рамках выбранного в работе приближения при  $n=1$  будет антиферромагнитным и диэлектрическим.

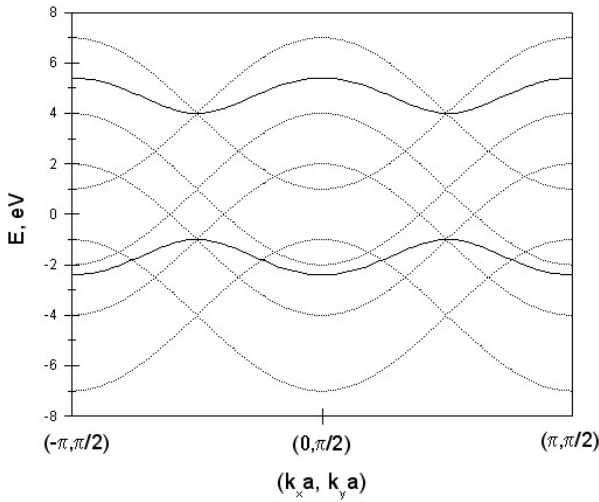


Рис. 1.3

Энергетический спектр модели Хаббарда при:  $\varepsilon_1 = -4\text{eV}$ ,  $\varepsilon_2 = -1\text{eV}$ ,  $U_1 = 8\text{eV}$ ,  $U_2 = 2\text{eV}$ ,  $B = 1.5\text{eV}$ . Сплошные кривые соответствуют значению  $S = 1/2$  (антиферромагнетизм), пунктирные – значению  $S = 0$  (парамагнетизм).

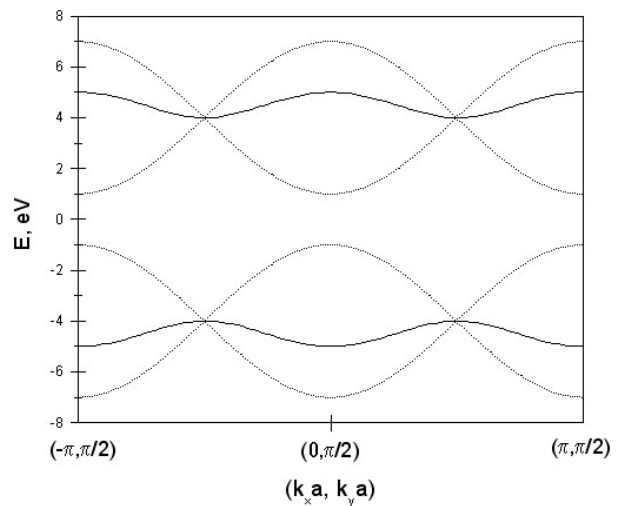


Рис. 1.4

Энергетический спектр модели Хаббарда при:  $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = -4\text{eV}$ ,  $U_1 = U_2 = 8\text{eV}$ ,  $B = 1.5\text{eV}$ . Сплошные кривые соответствуют значению  $S = 1/2$  (антиферромагнитное состояние), пунктирные – значению  $S = 0$ .

Предложенная методика расчета антикоммутирующей функции Грина позволяет не только определить спектр элементарных возбуждений, но и получить уравнение согласования для спина (намагниченности)  $S$ , имеющее нетривиальное антиферромагнитное решение. Это решение показывает, что в пределе сильных корреляций проекция спина  $S = 1/2$ .

Для объяснения некоторых свойств высокотемпературных сверхпроводников (ВТСП) как в сверхпроводящем, так и в нормальном состояниях возникает необходимость учета кроме медно-кислородных интегралов перескока еще и интегралов перескока между ближайшими кислородными атомами. Из качественных рассуждений понятно, что учет кислород-кислородного переноса дырок должен повлиять на вид энергетического спектра, что в свою очередь приведет к изменению других характеристик системы. Поэтому весьма актуальной задачей является вычисление энергетического спектра системы с учетом возможности переноса электронов (либо дырок) на следующий за ближайшим соседний узел. Целью следующего параграфа 2.2 " **$B - B' - U$  модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций**" является исследование зависимости энергетического спектра и намагниченности системы от величины интеграла переноса электронов на второй по близости соседний узел в случае двухмерной бипартитной модели Хаббарда.

По сравнению с предыдущим параграфом в гамильтониан Хаббарда включим член, описывающий перескоки электронов подрешетки  $C$  на ближайшие узлы этой же подрешетки:

$$H = H_0 + V, \quad (2.1)$$

$$H_0 = \sum_{\sigma, f \in A} \varepsilon_1 n_{f\sigma} + \sum_{\sigma, l \in C} \varepsilon_2 n_{l\sigma} + \sum_{\sigma, f, l} B_{fl} (a_{f\sigma}^+ a_{l\sigma} + a_{l\sigma}^+ a_{f\sigma}) + \sum_{\sigma, l', l} B_{l'l} a_{l'\sigma}^+ a_{l\sigma}, \quad (2.2)$$

$$V = \frac{U_1}{2} \sum_{\sigma, f \in A} n_{f\sigma} n_{f\bar{\sigma}} + \frac{U_2}{2} \sum_{\sigma, l \in C} n_{l\sigma} n_{l\bar{\sigma}}, \quad (2.3)$$

По методике, описанной выше, можно вычислить фурье-образы антикоммутаторных функций Грина для электронов разных подрешеток:

$$\langle\langle a_{k\sigma}^+ | a_{k\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{4} \left\{ \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E - U_1\Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E + U_1\Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \right.$$

$$+ \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E - U_1\Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E + U_1\Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} \Bigg\},$$

$$\langle\langle b_{k\sigma}^+ | b_{k\sigma} \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{4} \left\{ \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E - U_2\Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \frac{1 - (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E + U_2\Phi - t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \right.$$

$$\left. + \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E - U_2\Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} + \frac{1 + (\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k})/2t_k}{E + U_2\Phi + t_k - (\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2} \right\}.$$

где  $\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k} = \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + (U_1 + U_2)/2 + S(U_1 - U_2) - 4B' \cos(k_x a) \cdot \cos(k_y a)$ ,

$$\varepsilon'_1 - \varepsilon'_{2k} = \varepsilon_1 - \varepsilon_2 + (U_1 - U_2)/2 + S(U_1 + U_2) + 4B' \cos(k_x a) \cdot \cos(k_y a).$$

Полюса функций Грина определяют энергетический спектр:

$$E_{1-4} = ((\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2) \pm U_1\Phi \pm t_k, \quad (2.4)$$

$$E_{5-8} = ((\varepsilon'_1 + \varepsilon'_{2k})/2) \pm U_2\Phi \pm t_k. \quad (2.5)$$

На рис. 2.1 и 2.2 приведены энергетические спектры модели Хаббарда при значении спина  $S=0$  (парамагнетизм) и  $S = 0.47$  (антиферромагнетизм).

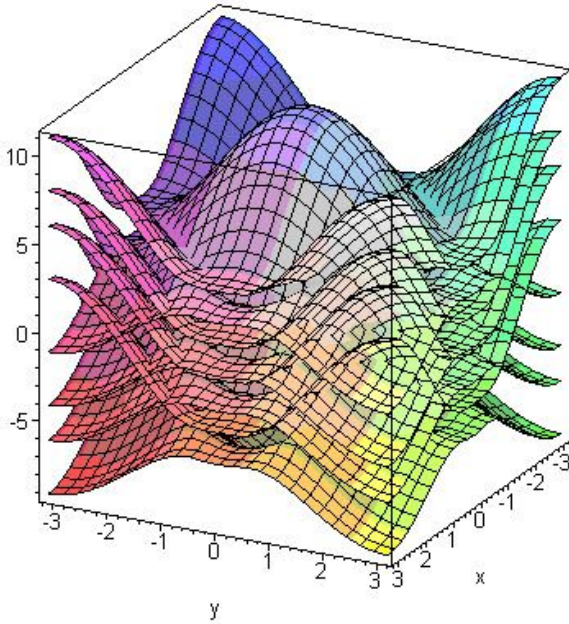


Рис. 2.1.

Энергетический спектр модели Хаббарда при следующих значениях параметров:

$$\varepsilon_1 = -4eV, \varepsilon_2 = -1eV, U_1 = 8eV, U_2 = 2eV, \\ B = 1.5eV, B' = -0.3B, S = 0.$$

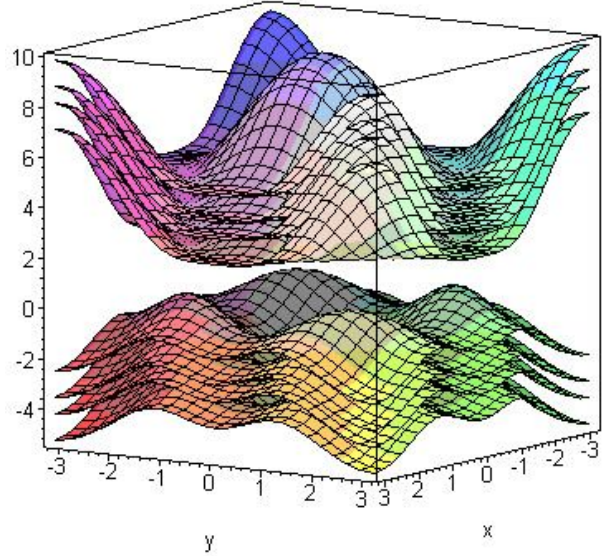


Рис. 2.2.

Энергетический спектр модели Хаббарда при следующих значениях параметров:

$$\varepsilon_1 = -4eV, \varepsilon_2 = -1eV, U_1 = 8eV, U_2 = 2eV, \\ B = 1.5eV, B' = -0.3B, S = 0.47.$$

На рис. 2.3 приведен энергетический спектр с учетом переноса электронов от атомов одного сорта к атомам этого же сорта по диагонали

квадрата в случае  $S=1/2$ . При данном значении  $B'$  учет перескока электронов от узла к узлу по диагонали квадрата приводит к сужению нижней подзоны, при этом существенным образом изменяется вид энергетической поверхности. Энергетические спектры, приведенные на рисунках, позволяют естественным образом объяснить переход металл-диэлектрик при изменении концентрации электронов  $n$ , тогда как применение стандартного приближения Хартри-Фока не приводит к такому результату [15], приходится прибегать к разного рода расщеплениям, например, типа "сплавной аналогии" [16].

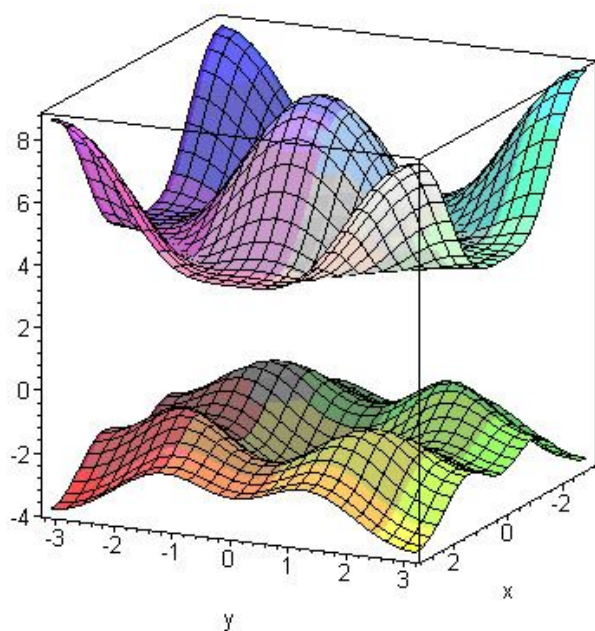


Рис. 2.3.

Энергетический спектр модели Хаббарда при следующих значениях параметров:

$$\varepsilon_1 = -4eV, \varepsilon_2 = -1eV, U_1 = 8eV, U_2 = 2eV, \\ B = 1.5eV, B' = -0.3B, S = 1/2.$$

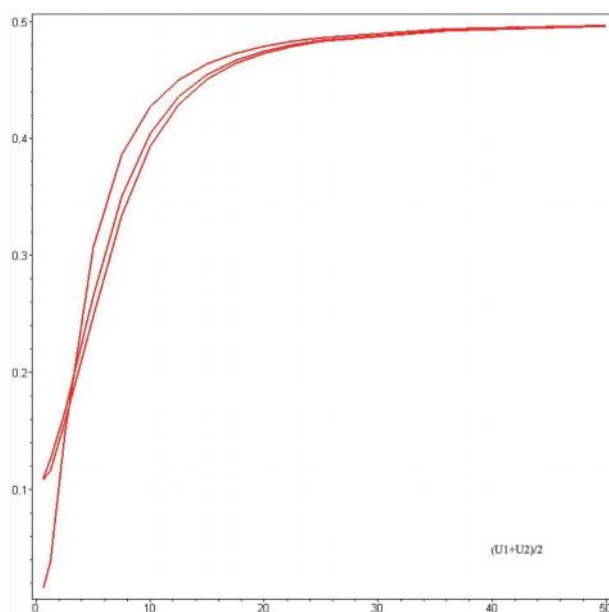


Рис. 2.4.

Спин (намагниченность)  $S$  как функция

$$(U_1 + U_2)/2 \text{ при } n=1, B = -0.45eV, T=0, \\ B' = 0(1), B' = -0.3B(2), B' = -0.45B(3).$$

После открытия высокотемпературных сверхпроводников было высказано предположение [17], что необычные свойства ВТСП могут быть единым образом описаны с помощью понятия латтинжеровской жидкости [18]. Изучение этих жидкостей показало, что одночастичная функция Грина не имеет полюсы, описывающие индивидуальные элементарные возбуждения. Точное решение одномерной модели Хаббарда [4] иллюстрирует явление разделения спиновой и зарядовой степеней свобод, которое является неотъемлемым свойством латтинжеровской жидкости.

Согласно Андерсону, если рассмотреть двумерную модель Хаббарда, при любой величине отталкивательного взаимодействия электронов на одном узле решетки обязательно появляются две хаббардовские подзоны, причем существование верхней хаббардовской подзоны должно обязательно приводить, по мнению Андерсона, к латтинджеровской жидкости для сильно взаимодействующих электронов, а не к ферми-жидкости.

Существует и другая точка зрения, согласно которой двумерная модель Хаббарда представляет собой нормальную ферми-жидкость, по крайней мере в случае слабой связи: после разработки [19] нового ренорм-группового метода появилась возможность корректного численного решения в случае слабых корреляций ренорм-групповых уравнений для двухмерной модели Хаббарда, эти решения [20] показали, что модель Хаббарда в случае слабого взаимодействия описывается как ферми-жидкость.

Целью следующего параграфа 2.3 является исследование одночастичной функции Грина в модели Хаббарда. На рис. 3.1 приведен энергетический спектр модели Хаббарда в области сильной связи ( $S=1/2$ ,  $n=1$ ). Из анализа рис. 3.1 следует, что энергетическая зона состоит из двух подзон, каждая подзона состоит из двух пересекающихся ветвей. Поверхность Ферми представляет собой набор таких точек в  $k$ -пространстве, в которых энергия элементарных возбуждений с учетом сдвига на химпотенциал равна нулю. На рис. 3.1 "поверхность Ферми", в отличие от фермиевской поверхности невзаимодействующей системы, представляет совокупность четырех точек  $(\pi/2, \pi/2)$ ,  $(\pi/2, -\pi/2)$ ,  $(-\pi/2, \pi/2)$ ,  $(-\pi/2, -\pi/2)$  в случае параметра решетки  $a=1$ , эти точки соответствуют максимумам верхней ветви нижней подзоны. Такой вид поверхности Ферми определяется влиянием учета переноса электронов по диагонали квадрата. Если не учитывать переносы электронов на вторые по близости соседние узлы кристаллической решетки, фермиевская поверхность совпадет с невозмущенной поверхностью Ферми.

При исследовании функций Грина можно выделить две подсистемы электронов, поведение которых различно. Для электронов одной подсистемы

можно получить следующие выражения для антикоммутирующих функций Грина:

$$\begin{aligned}\langle a_{k\uparrow}^+ | a_{k\uparrow} \rangle_E &= \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{2} \left\{ \frac{1 + (\varepsilon'_{1\uparrow} - \varepsilon'_{2k\uparrow})/2t_{k\uparrow}}{E - t_{k\uparrow} - (\varepsilon'_{1\uparrow} + \varepsilon'_{2k\uparrow})/2} + \frac{1 - (\varepsilon'_{1\uparrow} - \varepsilon'_{2k\uparrow})/2t_{k\uparrow}}{E + t_{k\uparrow} - (\varepsilon'_{1\uparrow} + \varepsilon'_{2k\uparrow})/2} \right\} \\ \langle b_{k\downarrow}^+ | b_{k\downarrow} \rangle_E &= \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{1}{2} \left\{ \frac{1 - (\varepsilon'_{1\downarrow} - \varepsilon'_{2k\downarrow})/2t_{k\downarrow}}{E - t_{k\downarrow} - (\varepsilon'_{1\downarrow} + \varepsilon'_{2k\downarrow})/2} + \frac{1 + (\varepsilon'_{1\downarrow} - \varepsilon'_{2k\downarrow})/2t_{k\downarrow}}{E + t_{k\downarrow} - (\varepsilon'_{1\downarrow} + \varepsilon'_{2k\downarrow})/2} \right\}.\end{aligned}$$

Рассмотрим поведение этих функций на границе зоны Бриллюэна ("уровне Ферми"). Функции Грина могут иметь следующие особенности:

$$\begin{aligned}E_{1,2} &= (\varepsilon'_{1\uparrow} + \varepsilon'_{2k\uparrow})/2 \pm t_{k\uparrow}, \\ E_{3,4} &= (\varepsilon'_{1\downarrow} + \varepsilon'_{2k\downarrow})/2 \pm t_{k\downarrow},\end{aligned}\tag{3.1}$$

что характерно для случая антиферромагнитного упорядочения в системе. В случае точно наполовину заполненной зоны ( $n=1$ ) и  $n < 1$  (в случае  $(1-n) \ll 1$ ) электроны в основном состоянии заполняют уровни энергии, соответствующие корням  $E_2$  и  $E_4$  (знаки минус перед  $t_k$  в (3.1)). Выделим в (3.1) функции Грина, соответствующие заполнению электронами в основном состоянии уровней энергии  $E_2$  и  $E_4$ :

$$\begin{aligned}\langle a_{k\uparrow}^+ | a_{k\uparrow} \rangle_{E_+} &= \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{(1 - (\varepsilon'_{1\uparrow} - \varepsilon'_{2k\uparrow})/2t_{k\uparrow})/2}{E + t_{k\uparrow} - (\varepsilon'_{1\uparrow} + \varepsilon'_{2k\uparrow})/2} \\ \langle b_{k\downarrow}^+ | b_{k\downarrow} \rangle_{E_+} &= \frac{i}{2\pi} \cdot \frac{(1 + (\varepsilon'_{1\downarrow} - \varepsilon'_{2k\downarrow})/2t_{k\downarrow})/2}{E + t_{k\downarrow} - (\varepsilon'_{1\downarrow} + \varepsilon'_{2k\downarrow})/2}.\end{aligned}\tag{3.2}$$

Числители в функциях Грина (3.2) играют роль вероятности нахождения электронов на соответствующих уровнях энергии (емкостей соответствующих уровней энергии). На рис. 3.2 приведены графики числителя функций Грина  $\langle a_{k\uparrow}^+ | a_{k\uparrow} \rangle_{E_+}$  и верхней ветви нижней подзоны модели Хаббарда в режиме сильной связи (графики для числителя и спектра элементарных возбуждений в случае функции Грина  $\langle b_{k\downarrow}^+ | b_{k\downarrow} \rangle_{E_+}$  имеют аналогичный вид). Из анализа рисунка следует, что минимум функции, соответствующей числителю функции



Грина (3.2), равный нулю, проходит по границе первой зоны Бриллюэна; энергии Ферми соответствует вероятность заполнения электроном со спином, направленным вверх, равная нулю, т.е. на уровне Ферми не может находиться электрон подрешетки А с проекцией спина, направленной вверх, и электрон подрешетки С с проекцией спина, направленной вниз.

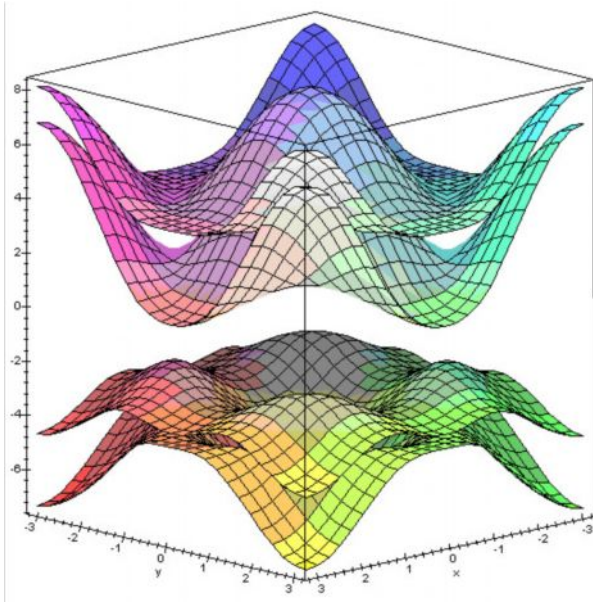


Рис. 3.1.

Энергетический спектр модели Хаббарда при следующих значениях параметров:

$$\varepsilon_1 = -4eV, \varepsilon_2 = -2eV, U_1 = 8eV, U_2 = 4eV, \\ B = 1.5eV, B' = -0.25B, \xi = 1/2, \eta = 1$$

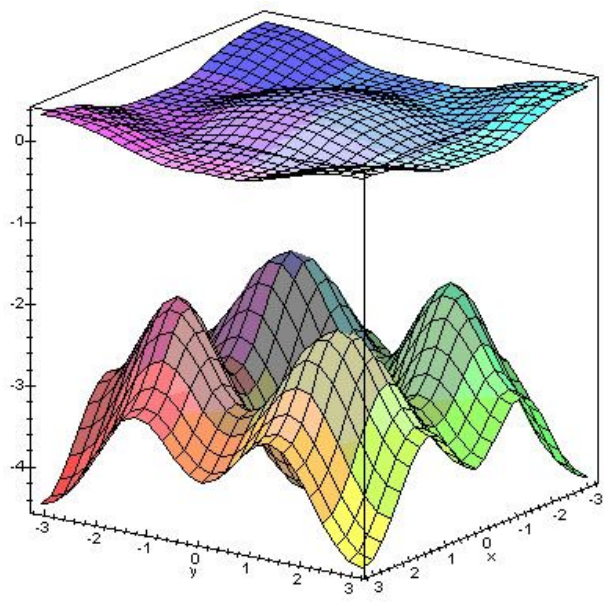


Рис. 3.2.

Емкость энергетических уровней (верхний график) и энергетический спектр (нижний график) для электронов подрешетки А, спины которых ориентированы вверх, при:

$$\varepsilon_1 = -4eV, \varepsilon_2 = -2eV, U_1 = 8eV, U_2 = 4eV, \\ B = 1.5eV, B' = -0.30B, \xi = 1/2, \eta = 1$$

Рассмотрим электроны другой подсистемы, которые описываются функциями Грина  $\langle a_{k\downarrow}^+ | a_{k\downarrow} \rangle_E$ ,  $\langle b_{k\uparrow}^+ | b_{k\uparrow} \rangle_E$ . Емкости энергетических уровней и энергетические поверхности, соответствующие заполнению электронами подрешетки С в основном состоянии, изображены на рис. 3.3. Из анализа рис. 3.3 следует, что "емкости" точек, соответствующих энергии Ферми, равны единице – электрон со спином вверх с вероятностью, равной вероятности достоверного события, заполняет уровень Ферми на узле подрешетки С (в основном состоянии). Аналогичным образом получается и в случае электронов подрешетки А со спином вниз – электрон со спином вниз с вероятностью,



равной единице, занимает состояние на границе зоны Бриллюэна (уровне Ферми).

Таким образом, исследование одночастичной функции Грина показывает, что в случае двух измерений при точно наполовину заполненной зоне модель Хаббарда в области сильного взаимодействия в рамках выбранного приближения вблизи границы зоны Бриллюэна, по-видимому, начинает терять свойства ферми-жидкости, но не может быть сведена к латтинджеровской жидкости.

Представляет интерес рассмотреть отдельно случай слабой связи, т.к. в последнее время появилось множество работ, посвященных исследованию двухмерной модели Хаббарда в случае слабого взаимодействия. Решив ренорм-групповые уравнения в [20], показали, что для двухмерной модели Хаббарда характерна ферми-жидкостная картина, причем учет энергии взаимодействия приводит к деформации поверхности Ферми по сравнению со случаем  $U=0$ .

В пределе слабой связи энергетический спектр представляет собой одну зону, получающуюся пересечением множества ветвей (энергетических поверхностей). Теперь в системе определяющую роль играют не электроны вблизи границы первой зоны Бриллюэна, как в случае сильной связи, а электроны вблизи поверхности Ферми, подвергшейся при учете конечного значения кулоновского потенциала деформации. На рис. 3.4 приведен спектр элементарных возбуждений вместе с плоскостью, соответствующей уровню Ферми. Из анализа рис. 3.4 следует, что поверхность Ферми деформируется, что согласуется с ранее полученными в рамках ренорм-группового анализа результатами, уровни энергии вблизи фермиевской поверхности заполняются электронами с конечной вероятностью. А это означает, что антикоммутирующие одночастичные функции Грина имеют полюса вблизи поверхности Ферми, следовательно, в пределе слабой корреляции модель Хаббарда описывается в рамках нормальной ферми-жидкости.

Таким образом, двумерная модель Хаббарда в случае сильных корреляций приобретает черты нефермижидкостной системы, но не может быть

сведена к латтинжеровской жидкости, а в случае слабых корреляций описывается в рамках нормальной ферми-жидкости.

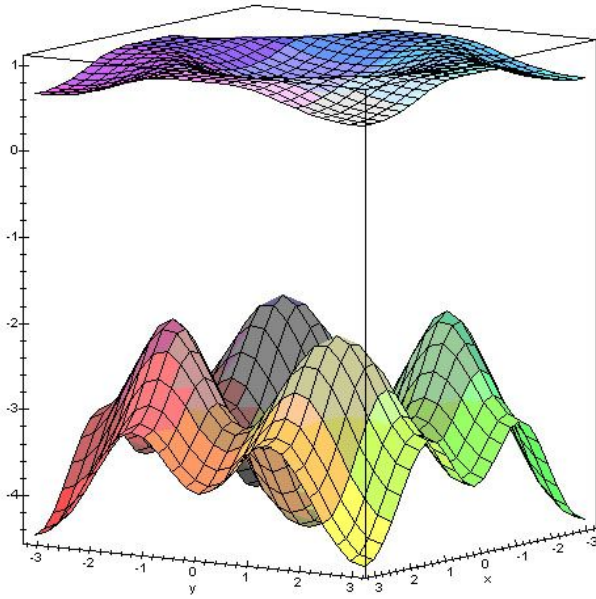


Рис. 3.3.

Емкость энергетических уровней (верхний график) и энергетический спектр (нижний график) для электронов подрешетки С, спины которых ориентированы вверх, при:

$$\varepsilon_1 = -4eV, \varepsilon_2 = -2eV, U_1 = 8eV, U_2 = 4eV, \\ B = 1.5eV, B' = -0.30B, S = 1/2, n = 1$$

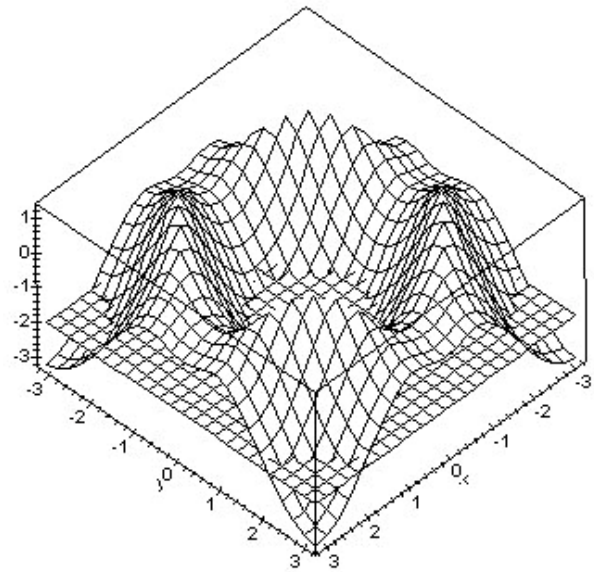


Рис. 3.4.

Поверхность Ферми в случае слабой связи, получающаяся при пересечении энергетической поверхности и плоскости, соответствующей уровню Ферми.

В следующей главе "Энергия основного состояния в  $B - B' - U$  модели Хаббарда" вычислена энергия основного состояния двухмерной двухподрешеточной модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций с учетом перескока электронов на следующие по близости узлы кристаллической решетки. Гамильтониан  $B - B' - U$  двухмерной бипартитной модели Хаббарда описывается формулой (2.1).

Воспользовавшись вышеприведенным методом можно получить следующее выражение для средней энергии системы:

$$E_0 = \langle H_0 \rangle + \langle V \rangle \quad (3.1)$$

где

$$\langle H_0 \rangle = - \sum_{k, \sigma} \frac{B_k^2}{4t_k} \left\{ f^+ \left( U_1 \Phi - t_k - \frac{B'_k + \sigma S(U_1 - U_2)}{2} \right) + f^+ \left( U_1 \Phi - t_k + \frac{B'_k + \sigma S(U_1 - U_2)}{2} \right) + \right. \\ \left. + f^+ \left( U_2 \Phi - t_k - \frac{B'_k + \sigma S(U_1 - U_2)}{2} \right) + f^+ \left( U_2 \Phi - t_k + \frac{B'_k + \sigma S(U_1 - U_2)}{2} \right) \right\} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned}
\langle V \rangle = & \frac{U_1}{8N} \sum_k \left\{ \left( 1 + \frac{S(U_1+U_2)-B'_k}{2t_k} \right) f^+ \left( t_k - U_1\Phi + \frac{S(U_1-U_2)+B'_k}{2} \right) + \left( 1 - \frac{S(U_1+U_2)-B'_k}{2t_k} \right) \right. \\
& \left[ 1 + f^+ \left( U_1\Phi - t_k + \frac{S(U_1-U_2)+B'_k}{2} \right) \right] \sum_p \left\{ \left( 1 - \frac{S(U_1+U_2)+B'_p}{2t_p} \right) f^+ \left( t_p - U_1\Phi + \frac{B'_p - S(U_1-U_2)}{2} \right) \right. \\
& \left. + \left( 1 + \frac{S(U_1+U_2)+B'_p}{2t_p} \right) \left[ 1 + f^+ \left( U_1\Phi - t_p + \frac{B'_p - S(U_1-U_2)}{2} \right) \right] \right\} + \frac{U_2}{8N} \sum_k \left\{ \left( 1 - \frac{S(U_1+U_2)-B'_k}{2t_k} \right) \right. \\
& \left. f^+ \left( t_k - U_2\Phi + \frac{S(U_1-U_2)+B'_k}{2} \right) + \left( 1 + \frac{S(U_1+U_2)-B'_k}{2t_k} \right) \left[ 1 + f^+ \left( U_2\Phi - t_k + \frac{S(U_1-U_2)+B'_k}{2} \right) \right] \right\} \\
& \sum_p \left\{ \left( 1 + \frac{S(U_1+U_2)+B'_p}{2t_p} \right) f^+ \left( t_p - U_2\Phi + \frac{B'_p - S(U_1-U_2)}{2} \right) + \left( 1 - \frac{S(U_1+U_2)+B'_p}{2t_p} \right) \right. \\
& \left. \left[ 1 + f^+ \left( U_2\Phi - t_p + \frac{B'_p - S(U_1-U_2)}{2} \right) \right] \right\} - \frac{U_1\Phi}{4} \sum_k \left[ \left( 1 + \frac{S(U_1+U_2)-B'_k}{2t_k} \right) \right. \quad (4.3)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left. f^+ \left( t_k - U_1\Phi + \frac{S(U_1-U_2)+B'_k}{2} \right) + \left( 1 - \frac{S(U_1+U_2)-B'_k}{2t_k} \right) f^+ \left( t_k - U_1\Phi - \frac{S(U_1-U_2)+B'_k}{2} \right) \right] - \\
& - \frac{U_2\Phi}{4} \sum_k \left[ \left( 1 - \frac{S(U_1+U_2)-B'_k}{2t_k} \right) f^+ \left( t_k - U_2\Phi + \frac{S(U_1-U_2)+B'_k}{2} \right) + \right. \\
& \left. + \left( 1 + \frac{S(U_1+U_2)-B'_k}{2t_k} \right) f^+ \left( t_k - U_2\Phi - \frac{S(U_1-U_2)+B'_k}{2} \right) \right].
\end{aligned}$$

В приведенных выше выражениях (4.2), (4.3)

$f^+(x) = (1 + \exp(\beta x))^{-1}$  – распределение Ферми,  $\Phi = \sqrt{0.25 - S^2}$ , суммирование по  $k$  и  $p$  производится в пределах первой зоны Бриллюэна,

$$B_k = -2B [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)],$$

$$B'_k = -4B' \cos(k_x a) \cos(k_y a).$$

На рис. 3.1 приведена зависимость энергии основного состояния  $E_0$  от  $(U_1+U_2)/2$  для трех значений интегралов переноса на второй ближайший соседний узел по диагонали квадрата. В случае слабых корреляций энергия основного состояния повышается при  $B' < 0$  поскольку коллективизированные вследствие малости энергий кулоновского взаимодействия электроны при учете интеграла переноса  $B'$  подвергаются тенденции локализации.

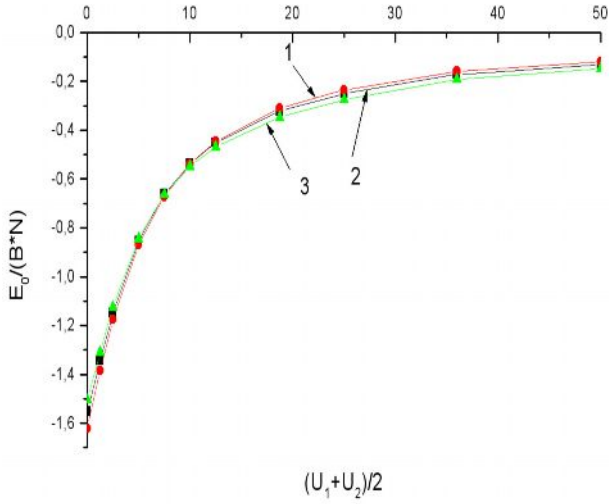


Рис. 3.1.

Энергия основного состояния  $E_0$  как функция  $(U_1 + U_2)/2$  при  $n=1$ ,  $B=1.5$  eV,  $T=0$ ,  $B'=0$  (1),  $B'=-0.3B$  (2),  $B'=-0.45B$  (3).

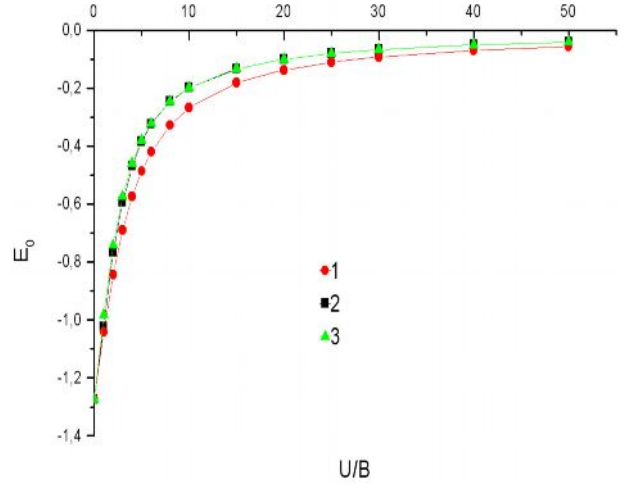


Рис.3.2.

Энергия основного состояния  $E_0$  как функция  $U/B$  при  $n=1$ ,  $T=0$ , в случаях: (1) – точное решение, (2) – вычисление по формуле (3.11) с учетом зависимости  $S$  от величины кулоновского потенциала  $U$ , (3) – вычисление по формуле (3.11) при  $S=1/2$ .

В [4] было получено точное выражение для энергии основного состояния одномерной модели Хаббарда. Для того, чтобы полученные результаты сравнить с результатом этой работы, получим из (4.1) в частном случае выражение для энергии основного состояния одномерной модели Хаббарда, полагая  $U_1 = U_2 = U$ ,  $B_k = -2B \cos(k_x a)$ ,  $B'_k = 0$ :

$$\begin{aligned} \frac{E_0}{BN} = & -\frac{2}{BN} \sum_k \frac{B_k^2}{t_k} f^+(U\Phi - t_k) + \frac{U}{4B} \left\{ 1 - \left[ \frac{2}{N} \sum_k \frac{SU}{t_k} f^+(U\Phi - t_k) \right]^2 \right\} - \\ & - \frac{U\Phi}{BN} \sum_k f^+(-U\Phi + t_k) \end{aligned} \quad (4.4)$$

На рис. 3.2 представлена зависимость энергии основного состояния от отношения  $U/B$  в трех разных случаях – точного вычисления  $E_0$  Либа и Ву, вычисления энергии основного состояния по формуле (4.4) с учетом зависимости спина  $S$  от величины кулоновского потенциала  $U$  и вычисления  $E_0$  по формуле (4.4) в случае спина  $S=1/2$ . Анализ графиков зависимостей энергии  $E_0$  от  $U/B$  показывает, что в пределе  $U=0$  и  $U=\infty$  энергии, вычисленные по формуле (4.4) и в случае точного решения, совпадают, качественно точное

решение и решение в приближении статических флуктуаций ведут себя одинаково. Имеется весьма неплохое количественное совпадение точного и приближенного решений – при, например,  $U/B=4$  отношение  $((E_0 - E_{0_{exact}})/E_{0_{exact}})$ , играющее роль относительной погрешности, порядка 18%, тогда как при  $U/B=2$  отношение  $((E_0 - E_{0_{exact}})/E_{0_{exact}})$  порядка 2%. В области промежуточных значений корреляций в приближении статических флуктуаций происходит, по-видимому, переоценка роли кулоновского взаимодействия. Самосогласованный учет зависимости спина  $S$  от величины кулоновского потенциала снижает величину переоценки роли кулоновского взаимодействия – кривая 2 на рис. 3.2.

Таким образом, учет переноса на второй по близости соседний узел влияет на поведение энергии основного состояния модели Хаббарда.

В четвертой главе "**Магнитная восприимчивость в  $B - B' - U$  модели Хаббарда**" проведены вычисление и исследование магнитной восприимчивости двухмерной модели Хаббарда, проведено сравнение с точным решением одномерной модели Хаббарда в магнитном поле, которое показало, что решение в приближении статических флуктуаций как качественно, так и количественно совпадает с точным решением.

Гамильтониан имеет вид (2.1) с учетом дополнительных слагаемых, описывающих зеемановскую энергию электронов:

$$H = H_0 + V, \quad (5.1)$$

$$H_0 = \sum_{\sigma, f \in A} \left( \varepsilon_1 + \frac{1}{2} \sigma \omega_{e1} \right) n_{f\sigma} + \sum_{\sigma, l \in C} \left( \varepsilon_2 + \frac{1}{2} \sigma \omega_{e2} \right) n_{l\sigma} + \\ + \sum_{\sigma, f, l} B_{fl} (a_{f\sigma}^+ a_{l\sigma} + a_{l\sigma}^+ a_{f\sigma}) + \sum_{\sigma, l', l} B_{l'l} a_{l'\sigma}^+ a_{l\sigma}, \quad (5.2)$$

$$V = \frac{U_1}{2} \sum_{\sigma, f \in A} n_{f\sigma} n_{f\bar{\sigma}} + \frac{U_2}{2} \sum_{\sigma, l \in C} n_{l\sigma} n_{l\bar{\sigma}}, \quad (5.3)$$

Получено следующее выражение для суммарной поперечной динамической восприимчивости системы:

$$\begin{aligned}
\chi^{+-}(q, \omega) = & \chi_{aa}^{+-}(q, \omega) + \chi_{ab}^{+-}(q, \omega) + \chi_{ba}^{+-}(q, \omega) + \chi_{bb}^{+-}(q, \omega) = \\
& \sum_p \sum_{\beta, \gamma} \frac{1}{4} \left\{ \frac{\left( \langle n_{p\downarrow}^a \rangle - \langle n_{p+q\uparrow}^a \rangle \right) \left[ \left( 1 - \frac{\varepsilon_{2\downarrow} - \varepsilon_{1\downarrow}}{2\beta t_p} \right) \left( 1 + \frac{\varepsilon_{2\uparrow} - \varepsilon_{1\uparrow}}{2\gamma t_{p+q}} \right) - \beta\gamma \frac{B_p}{t_p} \frac{B_{p+q}}{t_{p+q}} \right]}{\omega - \beta t_p - \gamma t_{p+q} + \frac{1}{2}(\omega_{e1} + \omega_{e2} + U_1 - U_2 - J_p + J_{p+q})} + \right. \\
& + \frac{\left( \langle a_{p+q\uparrow}^+ b_{p+q\uparrow} \rangle - \langle a_{p\downarrow}^+ b_{p\downarrow} \rangle \right) \left[ \left( 1 - \frac{\varepsilon_{2\downarrow} - \varepsilon_{1\downarrow}}{2\beta t_p} \right) \frac{B_{p+q}}{\gamma t_{p+q}} - \left( 1 - \frac{\varepsilon_{2\uparrow} - \varepsilon_{1\uparrow}}{2\gamma t_{p+q}} \right) \frac{B_p}{\beta t_p} \right]}{\omega - \beta t_p - \gamma t_{p+q} + \frac{1}{2}(\omega_{e1} + \omega_{e2} + U_1 - U_2 - J_p + J_{p+q})} + \\
& + \frac{\left( \langle b_{p+q\uparrow}^+ a_{p+q\uparrow} \rangle - \langle b_{p\downarrow}^+ a_{p\downarrow} \rangle \right) \left[ \left( 1 + \frac{\varepsilon_{2\downarrow} - \varepsilon_{1\downarrow}}{2\beta t_p} \right) \frac{B_{p+q}}{\gamma t_{p+q}} - \left( 1 + \frac{\varepsilon_{2\uparrow} - \varepsilon_{1\uparrow}}{2\gamma t_{p+q}} \right) \frac{B_p}{\beta t_p} \right]}{\omega - \beta t_p - \gamma t_{p+q} + \frac{1}{2}(\omega_{e1} + \omega_{e2} + U_1 - U_2 - J_p + J_{p+q})} + \\
& \left. + \frac{\left( \langle n_{p\downarrow}^b \rangle - \langle n_{p+q\uparrow}^b \rangle \right) \left[ \left( 1 + \frac{\varepsilon_{2\downarrow} - \varepsilon_{1\downarrow}}{2\beta t_p} \right) \left( 1 - \frac{\varepsilon_{2\uparrow} - \varepsilon_{1\uparrow}}{2\gamma t_{p+q}} \right) - \beta\gamma \frac{B_p}{t_p} \frac{B_{p+q}}{t_{p+q}} \right]}{\omega - \beta t_p - \gamma t_{p+q} + \frac{1}{2}(\omega_{e1} + \omega_{e2} + U_1 - U_2 - J_p + J_{p+q})} \right\}.
\end{aligned} \tag{5.4}$$

В формуле (5.4)  $\gamma$  и  $\beta$  принимают два значения:  $\gamma = +1, -1$ ;  $\beta = +1, -1$ .

$\chi_{aa}^{+-}(q, \omega)$  и  $\chi_{bb}^{+-}(q, \omega)$  являются динамическими откликами электронных подсистем **A** и **C** соответственно;  $\chi_{ab}^{+-}(q, \omega)$ ,  $\chi_{ba}^{+-}(q, \omega)$  описывают перенос намагниченности от одной электронной подсистемы к другой.

Вычисление корреляционных функций в числителе поперечной динамической восприимчивости (5.4) производится аналогичным образом. В итоге мы получим ( $n=1$ ,  $S=1/2$ ):

$$\begin{aligned}
\langle n_{p\downarrow}^a \rangle = & \frac{1}{2} \left[ \left( 1 - \frac{\varepsilon_{2\downarrow} - \varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p} \right) f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\downarrow} + \varepsilon_{2\downarrow}}{2} + t_p \right) + \left( 1 + \frac{\varepsilon_{2\downarrow} - \varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p} \right) f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\downarrow} + \varepsilon_{2\downarrow}}{2} - t_p \right) \right], \\
\langle n_{p+q\uparrow}^a \rangle = & \frac{1}{2} \left[ \left( 1 - \frac{\varepsilon_{2\uparrow} - \varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}} \right) f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\uparrow} + \varepsilon_{2\uparrow}}{2} + t_{p+q} \right) + \left( 1 + \frac{\varepsilon_{2\uparrow} - \varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}} \right) f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\uparrow} + \varepsilon_{2\uparrow}}{2} - t_{p+q} \right) \right],
\end{aligned} \tag{5.5}$$

$$\begin{aligned}
\langle n_{p\downarrow}^b \rangle = & \frac{1}{2} \left[ \left( 1 + \frac{\varepsilon_{2\downarrow} - \varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p} \right) f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\downarrow} + \varepsilon_{2\downarrow}}{2} + t_p \right) + \left( 1 - \frac{\varepsilon_{2\downarrow} - \varepsilon_{1\downarrow}}{2t_p} \right) f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\downarrow} + \varepsilon_{2\downarrow}}{2} - t_p \right) \right], \\
\langle n_{p+q\uparrow}^b \rangle = & \frac{1}{2} \left[ \left( 1 + \frac{\varepsilon_{2\uparrow} - \varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}} \right) f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\uparrow} + \varepsilon_{2\uparrow}}{2} + t_{p+q} \right) + \left( 1 - \frac{\varepsilon_{2\uparrow} - \varepsilon_{1\uparrow}}{2t_{p+q}} \right) f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\uparrow} + \varepsilon_{2\uparrow}}{2} - t_{p+q} \right) \right],
\end{aligned} \tag{5.6}$$

$$\begin{aligned}
\langle a_{p\downarrow}^+ b_{p\downarrow} \rangle &= \langle b_{p\downarrow}^+ a_{p\downarrow} \rangle = \frac{B_p}{2t_p} \left[ f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\downarrow} + \varepsilon_{2\downarrow}}{2} + t_p \right) - f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\downarrow} + \varepsilon_{2\downarrow}}{2} - t_p \right) \right], \\
\langle a_{p+q\uparrow}^+ b_{p+q\uparrow} \rangle &= \langle b_{p+q\uparrow}^+ a_{p+q\uparrow} \rangle = \frac{B_{p+q}}{2t_{p+q}} \left[ f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\uparrow} + \varepsilon_{2\uparrow}}{2} + t_{p+q} \right) - f^+ \left( \frac{\varepsilon_{1\uparrow} + \varepsilon_{2\uparrow}}{2} - t_{p+q} \right) \right],
\end{aligned} \tag{5.7}$$

где  $f^+(x) = 1/(1 + \exp(\beta x))$  - фермиевское распределение.

Отметим, что из, например, равенства (5.5) следует, что в случае больших значений кулоновского потенциала (по сравнению с энергией переноса)  $S=1/2$ . Подставляя (5.5)-(5.7) в формулу (5.4) мы будем иметь окончательное выражение для поперечной динамической восприимчивости системы, характеризующейся гамильтонианом Хаббарда.

На рис 5.1 приведен "спектр коллективных возбуждений". При указанных значениях параметров "спектр коллективных возбуждений" представляет собой зону, состоящую из 4 подзон, причем две центральные подзоны пересекаются и образуют единую подзону, так что можно говорить о наличии трех подзон. Спектр на рис 5.1 свидетельствует, по-видимому, о наличии антиферромагнитного упорядочения в двухмерной модели Хаббарда.

Представляет интерес исследовать поведение статической магнитной восприимчивости как функции величины  $\mathbf{q}$ . В работе [21] было произведено численное исследование статической магнитной восприимчивости  $\chi(q, 0)$  как функции  $q$  в случае точно наполовину заполненной зоны для решетки  $8 \times 8$ . Расчеты показали, что  $\chi(q, 0)$  имеет резкий пик при значении вектора  $q = (\pi, \pi)$ . С уменьшением температуры высота пика увеличивается. На рис. 5.2 представлен график зависимости статической магнитной восприимчивости как функции вектора антиферромагнитной волны  $\mathbf{q}$  для разных значений температуры  $T$  в пределах первой зоны Бриллюэна. В соответствии с результатами численного анализа восприимчивость имеет максимум в точке  $q = (\pi, \pi)$ . С уменьшением температуры высота пика увеличивается, а ширина пика становится меньше. Кроме того, в отличие от [21], исследуемая

зависимость имеет немонотонный характер, можно выделить точки локальных экстремумов.

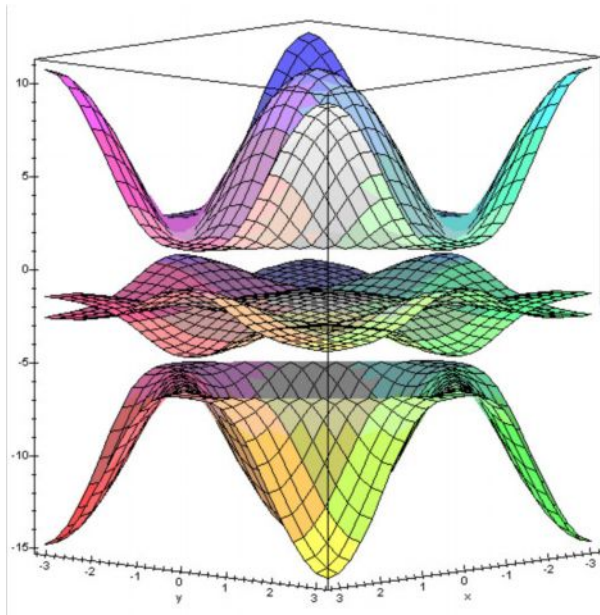


Рис. 5.1

Энергетический спектр (знаменатель поперечной восприимчивости) при следующих значениях параметров:

$$S = 1/2, \quad q \in (\pi, \pi), \quad U_1 = 6eV, \quad U_2 = 2eV, \\ B = 1.5eV, \quad B' = -0.3B, \quad n = 1$$

В [22] показано, что в таких системах, как  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ , допированных Li при низких температурах статическая магнитная восприимчивость значительно отклоняется от закона Кюри-Вейсса. В частности, при низких температурах происходит увеличение величины восприимчивости с увеличением температуры. Затем, пройдя через максимум, восприимчивость плавно спадает (см., например, рис. 3 в этой работе). Покажем, что при определенных условиях аналогичное поведение возможно и в модели Хаббарда при низких температурах. На рис. 5.3 приведены зависимости статической восприимчивости от температуры ( $T/B$ ) для различных значений величины интеграла переноса по диагонали квадрата при значении волнового вектора  $q = (\pi/2, \pi/2)$ . Из анализа рис. 5.3 следует, что учет интеграла переноса по диагонали квадрата  $B'$  приводит к резкому изменению поведения  $\chi(q)$  при понижении температуры. При учете  $B'$  на графике зависимости  $\chi(q)$  от  $q$  появляется максимум, причем, чем больше по абсолютной величине  $B'$ , тем

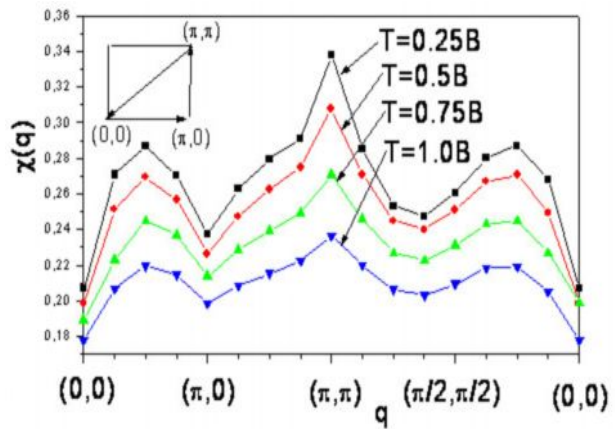


Рис. 5.2.

Статическая магнитная восприимчивость  $\chi(q, 0)$  как функция  $q$  при различных значениях температуры  $T$ ,

$$\text{при: } S = 1/2, \quad B = 1.5eV, \quad U_1 = 6eV, \\ U_2 = 2eV, \quad B' = -0.3B.$$



большей температуре соответствует максимум восприимчивости. Если система находится в режиме сильных корреляций, учет интеграла переноса  $B'$  в случае  $B' < 0$  ( $B > 0$ ) способствует делокализации электронов и, как следствие, приводит к уменьшению значения намагниченности по сравнению со случаем  $B' = 0$ . Если исходить из того, что в модели Хаббарда происходит конкуренция между процессами локализации и делокализации (коллективизации), то доля паулиевской восприимчивости будет в случае учета  $B'$  больше по сравнению со случаем, когда  $B' = 0$ .

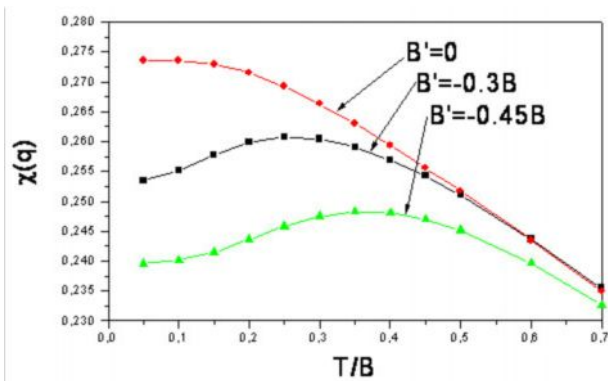


Рис. 5.3

Зависимость статической магнитной восприимчивости  $\chi(q, 0)$  от температуры при  $q = (\pi/2, \pi/2)$ ,  $U_1 = 6eV$ ,  $U_2 = 2eV$ ,  $B = \pm 5eV$ ,  $S = 1/2$ ,  $\varepsilon_1 = -3eV$ ,  $\varepsilon_2 = -1eV$  для различных значений  $B'$ .

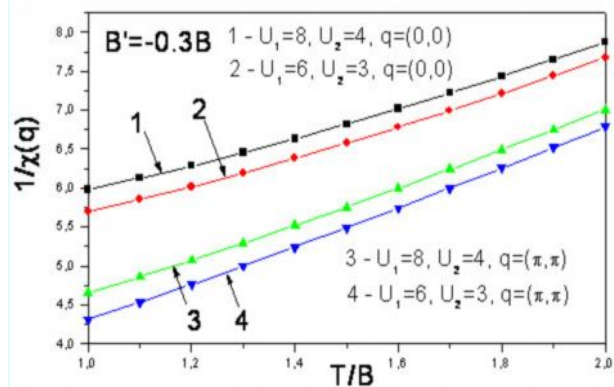


Рис. 5.4

Обратная восприимчивость как функция температуры при различных значениях кулоновских потенциалов (в eV) и волнового вектора.

В [23] были представлены зависимости статической восприимчивости от температуры для различных значений кулоновского потенциала  $U$ . Для сравнения результатов, которые получаются из наших вычислений с результатом этой работы, мы построили зависимость обратной восприимчивости от температуры (рис. 5.4) для разных значений кулоновских потенциалов. Сравнение результатов показывает, что качественно результаты совпадают. Что касается количественных характеристик, то они также совпадают по порядку величины, с увеличением температуры восприимчивость убывает (обратная восприимчивость возрастает). Графики приближаются к прямым линиям. Полученный результат подобен поведению Кюри-Вейсса ( $\chi \sim 1/(T + \theta)$  с  $\theta > 0$ ). Так что, по крайней мере, в пределах указанного

интервала  $U$  невозможен переход в ферромагнитное состояние. Анализ рис. 5.4 показывает, что величина обратной восприимчивости зависит от величины  $q$  (см. для сравнения рис. 5.1).

Представляет также интерес изучение поведения статической магнитной восприимчивости от величины кулоновского потенциала  $(U_1 + U_2)/2$  для различных значений волнового вектора и интеграла переноса  $B'$  (при постоянной температуре) – рис. 5.5. Из анализа кривых на рис. 5.5 следует, что статическая восприимчивость зависит как от величины кулоновского потенциала, так и интеграла переноса  $B'$  и величины  $q$ .

Для того, чтобы решить, насколько адекватно выражение (5.4) описывает поведение восприимчивости, необходимо сравнить с результатами точных вычислений. В [12] получено точное решение одномерной модели Хаббарда в магнитном поле. На рис. 5.6 приведены графики зависимости обратной статической восприимчивости, полученной в случае точного решения и обратной статической восприимчивости, полученной из (5.4) в приближении случайных фаз (с точностью до "нормировочной константы"):

$$\chi_{rpa}(q) = \chi(q, 0) / (1 - 0.5U\chi(q, 0)).$$

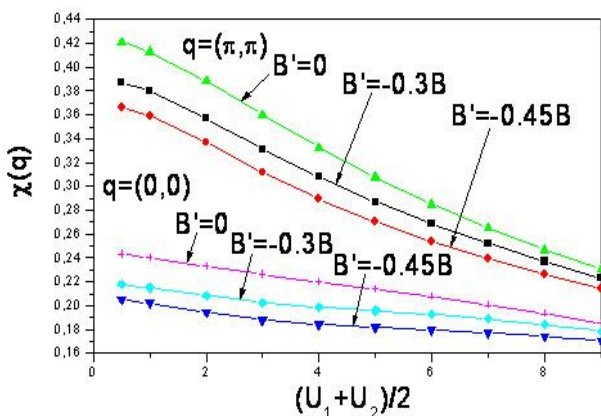


Рис. 5.5

Магнитная восприимчивость как функция кулоновского потенциала при различных значениях волнового вектора  $q$  и интеграла переноса  $B'$ , температура  $T=0,5B$ .

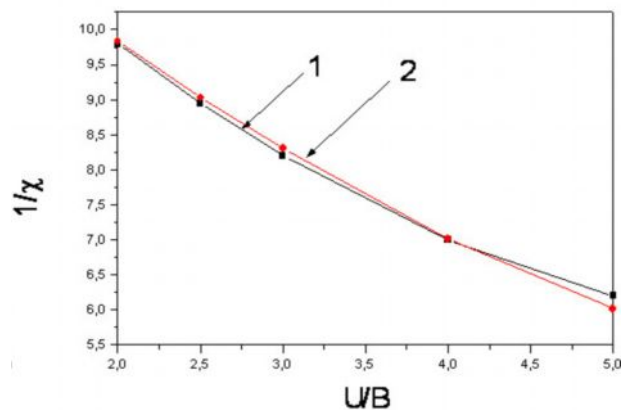


Рис. 5.6

Зависимость обратной восприимчивости одномерной модели Хаббарда от величины кулоновского потенциала в eV при:

$$S = 1/2, \quad \omega_c / B = 0.01, \quad T = 0.02B, \quad q = (\pi, \pi).$$

1 - точное решение, 2 – решение в ПСФ, следующее из формулы (5.4).

Из анализа графиков приведенных зависимостей следует, что качественно поведения обратной статической восприимчивости, вычисленной точно, и в

приближении статических флуктуаций совпадают. При расчетах мы полагали, что спин  $S = 1/2$ ; если воспользоваться зависимостью спина от величины кулоновского потенциала, то совпадение хода кривых будет более точным.

Таким образом, предлагаемая методика решения модели Хаббарда позволяет вычислить магнитную восприимчивость, исследовать характер зависимости восприимчивости от различных параметров системы. Сравнение полученных результатов в частном случае одномерной модели Хаббарда с точным решением одномерной модели Хаббарда в магнитном поле показало, что приближение статических флуктуаций вполне адекватно описывает свойства модели Хаббарда. Отметим, что ранее были проведены расчеты динамической восприимчивости в s-d модели различными методами (методами диаграммного анализа, неравновесного статистического оператора) с учетом кондовских аномалий, которые позволили понять, как провести адекватные расчеты в модели Хаббарда.

В пятой главе **"Наносистемы в модели Хаббарда"** проведено исследование наносистем в рамках модели Хаббарда. Последнее десятилетие характеризуется активным развитием нанотехнологии, атомной инженерии. Атомная инженерия основана на управлении с точностью до отдельного атома атомно-молекулярными взаимодействиями. Нанотехнология может быть определена как техника, основанная на манипуляциях с отдельными атомами и молекулами для построения сложных атомных структур. Но при этом необходимо учитывать, что в наносистемах возникают качественно новые эффекты, обусловленные размерным квантованием в малых структурах и другими явлениями и факторами. Поэтому наноструктуры в отличие от макротел обнаруживают существенно иные свойства. Эти свойства можно использовать в практических целях. Например, эксперименты свидетельствуют о том, что магнитные моменты атомов переходных металлов в нанокластерах могут иметь конечные значения, причем величина магнитного момента зависит от числа атомов в нанокластере – чем меньше число атомов в нанокластере, тем магнитный момент атома по абсолютной величине больше [13] – взяв

определенную подложку для наноструктур и нужное количество атомов в наносистеме, мы можем сконструировать, в зависимости от необходимости, нанокластеры с определенными значениями магнитных моментов атомов нанокластеров.

Цель этой главы – вычисление и исследование одночастичных функций Грина, термодинамических средних и спектра элементарных возбуждений в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций в случае, когда модель Хаббарда содержит 2, 3, 4, 5 атомов.

Гамильтониан Хаббарда в случае двух атомов имеет вид ( $i, j=1, 2$ ):

$$\hat{H} = \varepsilon \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} + B \sum_{i \neq j, \sigma} a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} n_{i\bar{\sigma}}. \quad (6.1)$$

Ценность гамильтониана (6.1) заключается в том, что в этом случае задача Хаббарда решается точно, причем без использования анзатца Бете. Из точного решения следует, что фурье-образы одночастичных функций Грина будут иметь вид ( $j=1, 2$ ), для определенности предположим, что  $U \gg 2B$  - имеем случай сильных корреляций):

$$\left\langle \left\langle a_{j\sigma}^+ \middle| a_{j\sigma} \right\rangle \right\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/4}{E - \varepsilon - B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon + B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon - U - B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon - U + B} \right\} \quad (6.2)$$

Как показали ранее, решение модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций довольно адекватно описывает свойства модели Хаббарда. Поэтому с методической точки зрения было бы интересно задачу о димере решить в приближении статических флуктуаций. Эта задача была решена. Было показано, что в рамках выбранного приближения:

$$\left\langle \left\langle a_{j\sigma}^+ \middle| a_{j\sigma} \right\rangle \right\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \left\{ \frac{1/4}{E - \varepsilon - B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon + B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon - U - B} + \frac{1/4}{E - \varepsilon - U + B} \right\} \quad (6.3)$$

Сравнение приближенного решения (6.3) и точного решения (6.2) показывает, что функции Грина совпадают. Таким образом, приближение статических флуктуаций при решении двухузельной задачи дает решение, совпадающее с точным решением. Это позволяет надеяться, что приближение статических флуктуаций можно применить для исследования наносистем. Было

осуществлено вычисление и исследование одночастичных функций Грина, термодинамических средних и спектра элементарных возбуждений в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций в случае, когда модель Хаббарда содержит 3, 4, 5 атомов.

На рис. 5.1 приведены графики зависимости  $\langle n_{j\uparrow} n_{j\downarrow} \rangle$  в случае различных конфигураций атомов. График 1 на этом рисунке характеризует «распределение двоек» в случае двух атомов. График имеет вид, напоминающий фермиевское распределение с учетом того, что в области слабых корреляций коррелятор  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle = \langle n_{1\uparrow} \rangle \langle n_{1\downarrow} \rangle = 0.25$ ; из-за малости значения кулоновского потенциала вероятность обнаружения двух электронов на одном узле максимальна. В области  $U \approx 2V$  значение рассматриваемого коррелятора резко понижается, причем, чем ниже температура, тем "ступенька" оказывается резче. В области сильных корреляций  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle = 0$  – большое значение кулоновского потенциала не позволяет локализоваться двум электронам на одном узле. Поведение коррелятора на втором узле полностью повторяет поведение коррелятора на первом узле, так как узлы являются симметричными.

В случае наносистемы, состоящей из трех узлов, корреляционная функция  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  вблизи  $U=0$  даже при незначительном увеличении  $U$  резко уменьшается до значения  $0.25 - 0.25/4 \approx 0.187$ . Уменьшение обусловлено тем, что первый атом является периферийным, поэтому вероятность того, что два электрона окажутся на первом (или третьем) узле, незначительна. Наличие «плато» в случае слабых и промежуточных корреляций, можно, по-видимому, объяснить тем, что уровни энергии в случае периферийных узлов имеют резко различающиеся «емкости». В случае второго атома коррелятор  $\langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$  начинает уменьшаться при энергии  $U$ , превышающей аналогичный случай в случае двух узлов, поскольку вероятность нахождения двух электронов на центральном узле будет больше, чем на периферийных узлах. В случае сильных корреляций термодинамические средние  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  и  $\langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$  устремляются к нулю по той же причине, что и в случае нанокластера из двух атомов. Когда

нанокластер состоит из четырех атомов, наличие двух центральных атомов позволяет перемешивать состояния периферийных атомов, поэтому «предварительный спад» корреляторов начинается не при  $U \neq 0$ , корреляторы по этой же причине устремляются к нулю при больших значениях  $U$ . Проанализируем теперь поведение кривых 4 и 5 при  $U/B \approx 2.5$ . Причина того, что в случае трех атомов термодинамическое среднее, описывающее вероятность нахождения на центральном узле в случае трех атомов будет больше по сравнению с четырьмя узлами, заключается в том, что на центральный атом могут переходить электроны как с первого, так и с третьего узла, тогда как в случае четырех атомов центральных узлов два – периферийные атомы не могут «насытить» два центральных узла.

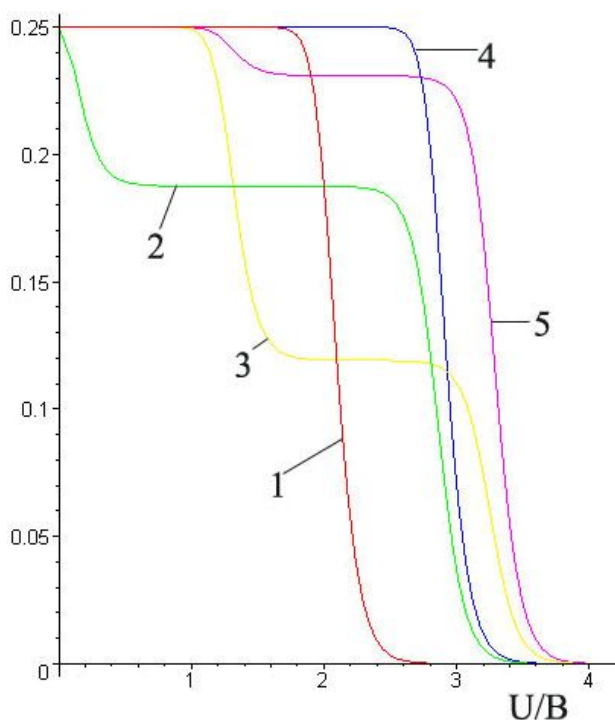


Рис. 5.1.

Зависимость корреляционной функции  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  - «распределения двоек» от отношения  $U/B$  в случае  $S = 0$ ,  $B = \text{const}$ ,  $\beta = 1/kT = 20$ . График 1 -  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  в случае двух атомов, 2 -  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  в случае трех узлов, 3 -  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  в случае четырех узлов, 4 -  $\langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$  в случае трех узлов, 5 -  $\langle n_{2\uparrow} n_{2\downarrow} \rangle$  в случае четырех узлов.

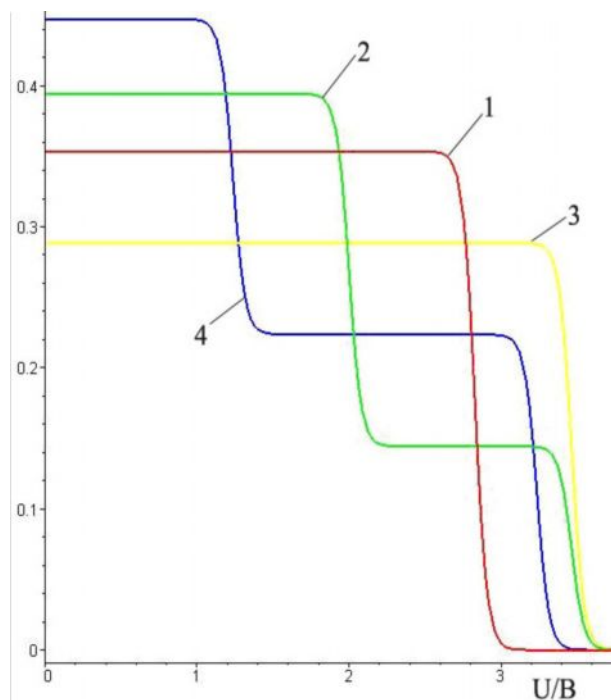


Рис. 5.2

Зависимость корреляционных функций:  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  для трех узлов (график 1),  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  для пяти узлов (график 2),  $\langle a_{2\uparrow}^+ a_{3\uparrow} \rangle$  для пяти узлов (график 3),  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  для четырех узлов (график 4) от величины кулоновского потенциала  $U$  при значениях параметров  $B = 1 \text{ eV}$ ,  $\beta = 50$  ( $\beta = 1/kT$ ).

На рис. 5.2 приведены графики зависимости корреляционных функций, характеризующие перескоки электронов с узла на узел, взятых по модулю, от величины кулоновского потенциала при постоянном значении интеграла перескока. В режиме слабой связи наиболее эффективно электроны могут переходить с первого атома на второй атом и, наоборот, в случае наносистемы из четырех атомов. В этом случае кулоновское отталкивание электронов незначительно и переходы регулируются в основном принципом Паули – наличие четного числа электронов с проекциями спинов как вниз, так и вверх определяет максимальное значение вероятности перехода. Если в режиме слабой связи сравнивать наносистемы из трех и пяти атомов, то более эффективно переходы электронов происходят в случае пяти атомов – в этом случае электроны более "коллективизированы". Основное состояние наносистем является антиферромагнитным, поэтому переходы электронов в случае пяти атомов будут происходить интенсивнее. В области сильной связи кулоновское отталкивание электронов на одном узле оказывается настолько значительным, что переносы электронов с узла на узел становятся невозможными (особенно в случае низких температур). В случае графиков 1 и 3 корреляционные функции в режимах слабой и промежуточной связей не зависят от величины кулоновского потенциала, спадая до нулевого значения в режиме сильной связи.

Понижение энергий основного состояния в случае модели Хаббарда обусловлено переходами электронов с узла на узел, чем "интенсивнее" происходит перенос электронов с узла на узел, тем энергия наносистемы ниже. На рис. 5.3 приведены графики для энергий основного состояния в перерасчете на один атом (удельных энергий основного состояния) от отношения  $U/V$  в различных случаях. Из анализа графиков на рис. 5.3 следует что, с энергетической точки зрения наносистема, состоящая из четырех узлов является более устойчивой. Энергии основного состояния в перерасчете на один атом в случае слабых и промежуточных корреляций оказались неодинаковыми, это свидетельствует о неэкстенсивном характере поведения

наносистем. В случае сильных корреляций энергии в случае всех трех конфигураций устремляются к одному и тому же значению.

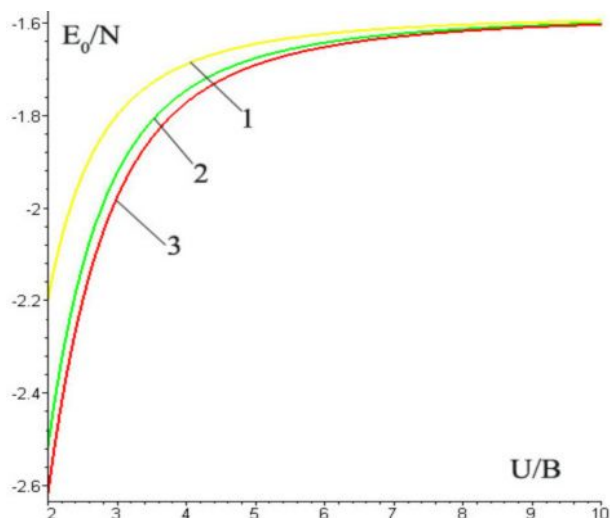


Рис. 5.3.

Зависимость энергии основного состояния в перерасчете на один атом от отношения  $U/B$  в случае  $\beta = 1/kT = 1$ ,  $S = 0$ .

1 – для двух атомов,  
2 – для трех атомов, 3 – для четырех атомов.

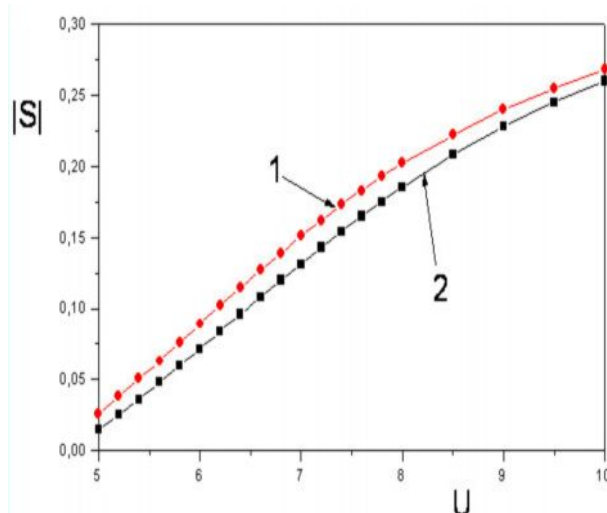


Рис. 5.4

Зависимости величины проекции спина  $S$ , взятой по модулю, от кулоновского потенциала  $U$ , при значениях

$\beta = 1$  ( $\beta = kT$ ),  $B = -2$ ,  $S_1 = 1/2$ . 1 – для трех атомов, 2 – для пяти атомов.

В приближении статических флуктуаций при учете влияния подложки на атомы наносистемы можно получить самосогласованное уравнение для определения среднего значения проекции спина  $S$ . Решение самосогласованного уравнения для трех и пяти атомов приведено на рис. 5.4. Из анализа рисунка следует, что в случае пяти атомов величина проекции спина, взятая по модулю, меньше аналогичной величины в случае трех атомов в наносистеме. Как было отмечено выше, эксперименты показали, что величина проекции спина (магнитного момента) атома зависит от количества атомов в наносистеме: чем больше число атомов в нанокластере, тем магнитный момент атома по величине меньше [13]. Исследование поведения нанокластеров с учетом влияния атомов подложки на свойства атомов наносистемы позволяет объяснить наблюдаемое явление уменьшения величины магнитного момента (спина) при увеличении числа узлов в наносистеме. Из результатов вычислений следует, что возможно «управление» значением проекции спина исследуемого атома путем изменения температуры, потенциала кулоновского поля.



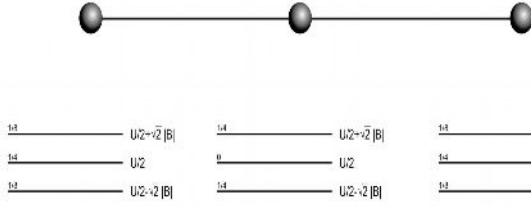


Рис. 5.5

Энергетический спектр в случае трех атомов в наносистеме. Значения над уровнями энергии слева показывают «емкости» (вероятности заполнения электронами) соответствующих уровней энергии.

На рис. 5.5, 5.6 приведены энергетические спектры для наносистем, состоящих из трех и пяти атомов. Значения над уровнями энергии слева показывают вероятности заполнения электронами соответствующих уровней энергии.

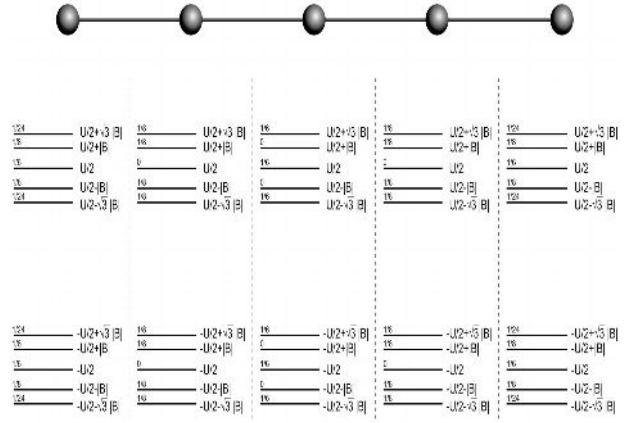


Рис. 5.6

Энергетический спектр наносистемы из пяти атомов. Значения над уровнями энергии слева показывают «емкости» (вероятности заполнения электронами) соответствующих уровней энергии.

Шестая глава называется **"Исследование структурных элементов фуллерена в модели Хаббарда"**. Цель настоящей главы – вычисление и исследование одночастичных антикоммутирующих функций Грина, энергетического спектра, различных корреляционных функций и энергии основного состояния в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций в случае пятичленных и шестичленных циклов, являющихся структурными элементами фуллерена (фуллерен  $C_{60}$  состоит из 20 шестичленных и 12 пятичленных циклов).

Гамильтониан наносистемы, состоящей из пяти атомов, имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{V},$$

$$\hat{H}_o = \varepsilon \sum_{i=1}^5 (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_{\sigma} (a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma} + a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{3\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{3\sigma} +$$

$$+ a_{4\sigma}^+ a_{3\sigma} + a_{3\sigma}^+ a_{4\sigma} + a_{4\sigma}^+ a_{5\sigma} + a_{5\sigma}^+ a_{4\sigma} + a_{1\sigma}^+ a_{5\sigma} + a_{5\sigma}^+ a_{1\sigma})$$

$$\hat{V} = U \sum_{i=1}^5 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.$$

Гамильтониан наносистемы, состоящей из шести атомов в виде правильного шестиугольника, представим в виде:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_o + \hat{V}, \\ \hat{H}_o &= \varepsilon \sum_{i=1}^6 (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + \sum_{\sigma} \left( B' (a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma} + a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma}) + B (a_{3\sigma}^+ a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^+ a_{3\sigma}) + \right. \\ &\quad \left. + B' (a_{4\sigma}^+ a_{3\sigma} + a_{3\sigma}^+ a_{4\sigma}) + B (a_{4\sigma}^+ a_{5\sigma} + a_{5\sigma}^+ a_{4\sigma}) + B' (a_{5\sigma}^+ a_{6\sigma} + a_{6\sigma}^+ a_{5\sigma}) + B (a_{1\sigma}^+ a_{6\sigma} + a_{6\sigma}^+ a_{1\sigma}) \right), \\ \hat{V} &= U \sum_{i=1}^6 n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.\end{aligned}$$

Вычисления энергии основного состояния свидетельствует о том, что шестичленный цикл при учете изменения интеграла переноса в случае "двойной связи" является энергетически более выгодным по сравнению с пятичленным циклом и простым шестичленным циклом (рис. 6.1). Показана возможность «управления» количеством электронов в случае пятичленного и шестичленного циклов (рис. 6.2).

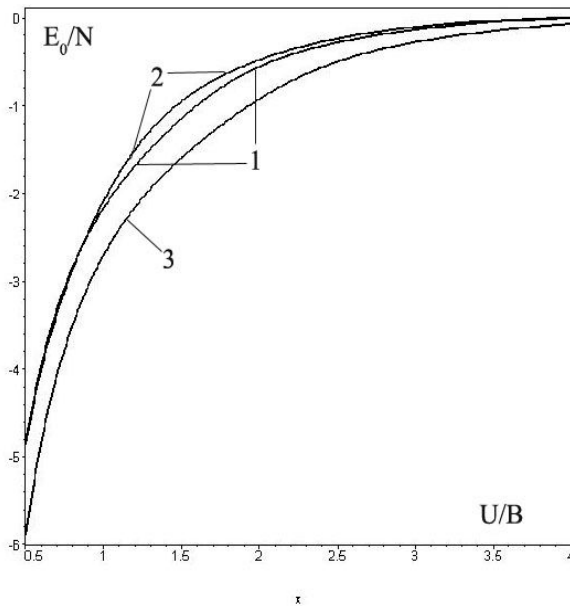


Рис. 6.1.

Средняя энергия наносистем (энергия основного состояния) как функция  $U/B$  при значениях параметров:  $\beta = 5$  ( $\beta = 1/kT$ ),  $B' = 1, 4B$ . 1 – простой гексагон ( $B' = B$ ), 2 – пентагон, 3 – гексагон с разными значениями интегралов переноса при  $B' = 1, 4B$ .

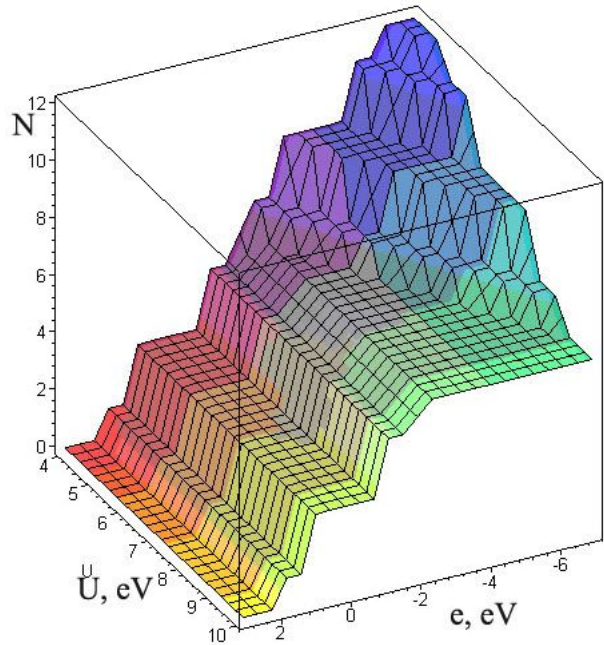


Рис. 6.2.

Количество электронов  $N$  в шестичленном цикле в зависимости от собственной энергии  $\varepsilon = e$  и величины кулоновского потенциала  $U$  при значениях параметров:  $B = -1\text{eV}$ ,  $\beta = 50$  ( $\beta = 1/kT$ ).

На рис. 6.3 приведена зависимость корреляционной функции  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  от отношения  $U/B$ . Из анализа рисунка следует, что в случае слабой связи узлы нанокластеров с одинаковой вероятностью могут быть заняты двумя

электронами как в случае пятичленного, так и шестичленного цикла. В случае сильной связи коррелятор  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  больше в случае шестичленного цикла с модифицированным интегралом переноса, поскольку в этом случае степень обобщественности электронов оказывается больше. Действительно, как показывает анализ рис. 6.4, в случае сильных корреляций аномальные средние  $\langle a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow} \rangle$ , описывающие переходы электронов с узла на узел наносистемы, больше в случае шестичленного цикла с модифицированным интегралом переноса. Графики на рис. 6.4 находятся в согласии с графиками на рис. 6.3. Отметим, что корреляционные функции  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  и  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{6\uparrow} \rangle$  для шестичленного цикла с разными значениями интеграла перескока в случае слабой и промежуточных связей сильно отличаются друг от друга, тогда как в случае сильной связи из-за большого значения кулоновского потенциала они становятся одинаковыми. При низких температурах корреляционные функции, приведенные на рис. 6.3 и 6.4, имеют вид многоступенчатых функций, ступенчатость этих функций определяется энергетическим спектром рассматриваемых атомных структур.

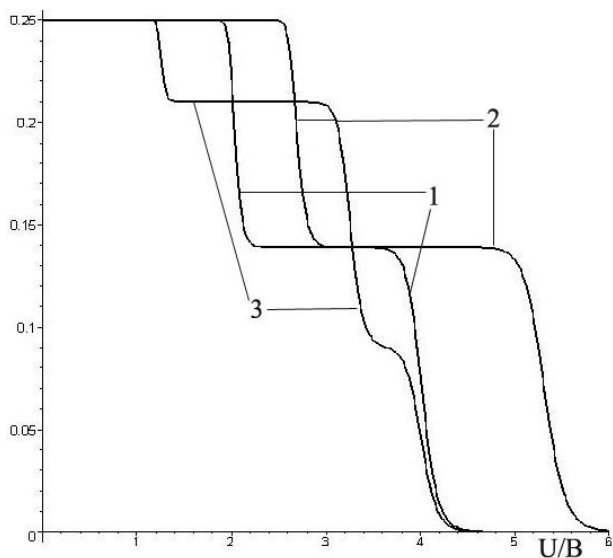


Рис. 6.3

Зависимость корреляционной функции  $\langle n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \rangle$  от отношения  $U/B$  при значениях параметров  $\beta = 50$  ( $\beta = 1/kT$ ),  $B' = 1,5B$ . 1 – простой шестичленный цикл, 2 – шестичленный цикл с разными интегралами перескока, 3 – пятичленный цикл.

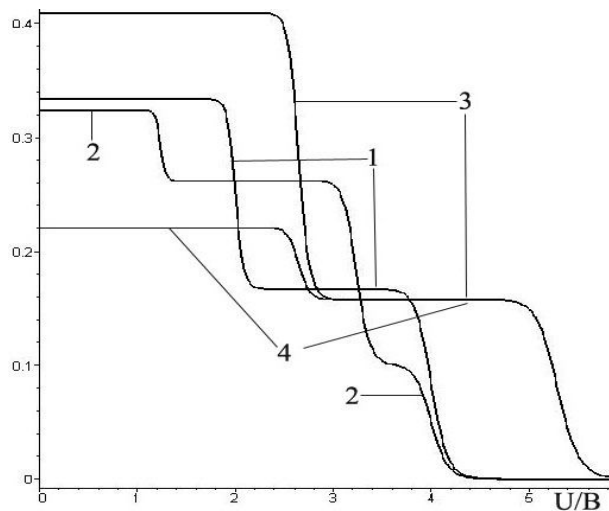


Рис. 6.4.

Коррелятор  $\langle a_{i\uparrow}^+ a_{j\uparrow} \rangle$  как функции  $U/B$  при:  $\beta = 50$  ( $\beta = 1/kT$ ),  $B' = 1,5B$ . 1 –  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  для простого гексагона, 2 –  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  для пентагона, 3 –  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$  для гексагона с разными значениями интегралов переноса, 4 –  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{6\uparrow} \rangle$  для гексагона с разными значениями интегралов переноса.

Из вида графиков на рис. 6.3 и 6.4 можно сделать важный вывод о том, что при наличии двойной связи «токи» в режиме сильных корреляций будут «протекать», в основном, по атомам шестичленного цикла. В магнитном поле в пятичленных и шестичленных циклах должны возникать, например, в случае углерода,  $p$ -электронные ( $\pi$ -электронные) «токи». «Токи» могут быть значительными даже в режиме сильных корреляций, как это следует из анализа графиков на рис. 6.3 и 6.4, в случае гексагональной структуры (шестичленного цикла) при наличии двойной связи.

В седьмой главе **"Исследование фуллерена  $C_{60}$  в модели Хаббарда"** проводится исследование фуллерена  $C_{60}$  в рамках модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Вычислена одночастичная функция Грина, определен энергетический спектр. Проведено сравнение характеристик фуллерена с характеристиками изолированных димера, гексагона и пентагона.

Гамильтониан модели Хаббарда, состоящей из 60 атомов фуллерена  $C_{60}$ , представим в виде:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \hat{H}_o + \hat{V}, \\ \hat{H}_o &= \varepsilon \sum_{i=1}^{60} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) + B \sum_{i \neq j, \sigma} (a_{i\sigma}^+ a_{j\sigma} + a_{j\sigma}^+ a_{i\sigma}), \\ \hat{V} &= U \sum_{i=1}^{60} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}.\end{aligned}$$

На рис. 7.1 для приведен энергетический спектр модели фуллерена  $C_{60}$  при значениях параметров  $U/B=8$  в условных энергетических единицах. Спектр элементарных возбуждений представляет собой две хаббардовские подзоны, каждая из которых состоит из 15 подуровней энергии. Отметим, что если значение кулоновского потенциала взять меньше по величине, то ширина щели между верхней и нижней подзонами станет меньше, например, можно добиться, чтобы значение для энергетической щели согласовалось с экспериментальным значением  $E_g = 1.7 - 1.9 \text{ eV}$ .

На рис. 7.2 приведена зависимость энергии основного состояния в перерасчете на один атом (удельной энергии основного состояния) от отношения величины кулоновского потенциала к интегралу переноса, для

модели фуллерена и модели отдельно взятого шестичленного цикла (гексагона), входящего в состав фуллерена. Из анализа графиков на рис. 2 следует, что конфигурация из шестидесяти атомов в случае модели фуллерена энергетически выгоднее по сравнению с конфигурацией из шестичленного цикла – исключительная механическая и химическая устойчивость молекулы фуллерена находит в этом случае теоретическое объяснение.

На рис. 7.3 приведены зависимости корреляционной функции  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$ , взятой по модулю, модели фуллерена  $C_{60}$  (верхний график) и шестичленного цикла (нижний график) от отношения  $U/B$ . Анализ графиков, приведенных на рис. 7.3, показывает, что степень делокализации электронов в случае модели фуллерена  $C_{60}$  больше по сравнению с отдельно взятым шестичленным циклом, даже в случае режима сильной связи.

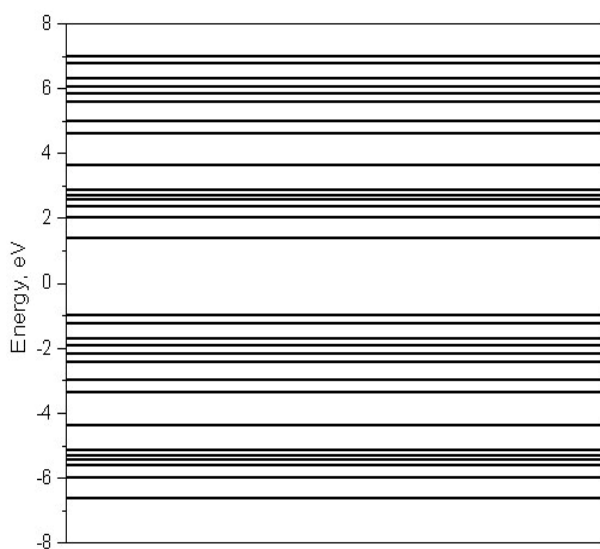


Рис. 7.1.

Энергетический спектр модели фуллерена  $C_{60}$  при  $U/B = 8$  в условных энергетических единицах без учета двойной связи.

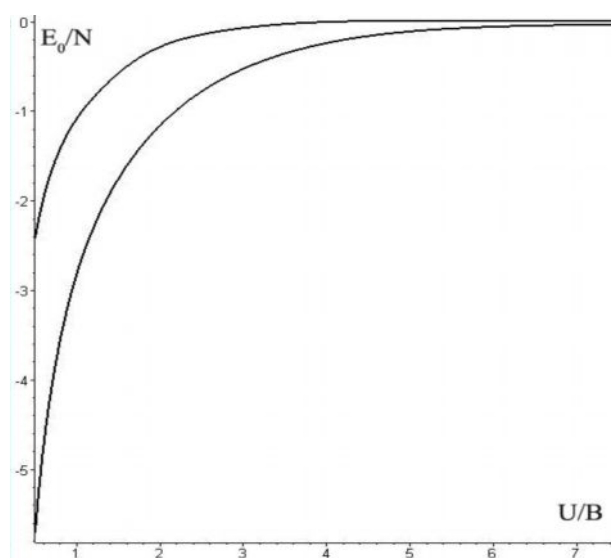


Рис. 7.2.

Зависимость энергии основного состояния модели фуллерена  $C_{60}$  (нижний график) и шестичленного цикла – гексагона (верхний график) от отношения  $U/B$ .

Интенсивность переноса электронов от узла к узлу в случае фуллерена значительно больше по сравнению со случаем отдельно взятого гексагона, что приводит к тому, что конфигурация атомов в виде фуллерена становится энергетически более выгодной по сравнению с гексагоном, тогда как вычисления показывают, что конфигурация шести атомов в виде правильного шестиугольника энергетически выгоднее по сравнению с другими

конфигурациями этих шести атомов. Большая степень делокализации (степень коллективизации) электронов приводит к исключительной устойчивости молекулы фуллерена.

Результат, приведенный на рис. 7.3 находится в полном согласии с результатом, приведенным на рис. 7.4, где приведены зависимости корреляционной функции  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  модели фуллерена  $C_{60}$  (верхний график) и отдельно взятого шестичленного цикла (нижний график) от отношения кулоновского потенциала к интегралу переноса. Из-за сильной делокализации электронов вероятность обнаружения двух электронов с разными проекциями спинов на одном узле имеет конечное значение даже в случае режима сильной связи.

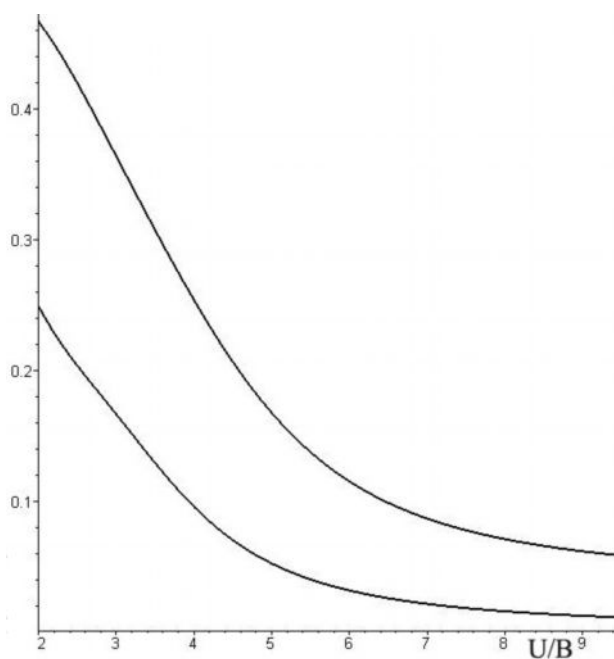


Рис. 7.3

Зависимости корреляционной функции  $\langle a_{1\uparrow}^+ a_{2\uparrow} \rangle$ , взятой по модулю, модели  $C_{60}$  (верхний график) и шестичленного цикла (нижний график) от отношения  $U/B$  при  $\beta = 1/kT = 5$ .

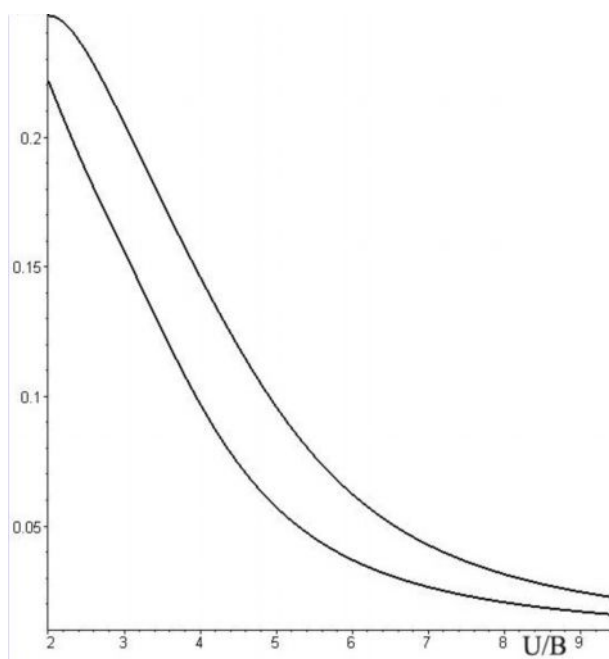


Рис. 7.4

Зависимости корреляционной функции  $\langle n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} \rangle$  модели фуллерена  $C_{60}$  (верхний график) и шестичленного цикла (нижний график) от отношения  $U/B$  при  $\beta = 1/kT = 5$ .

В заключении сделаны необходимые выводы и подытожены важнейшие результаты диссертационной работы.

**Основные результаты, выносимые на защиту:**

1. Разработан метод решения модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций. Этот метод позволил исследовать свойства модели Хаббарда пределах как слабой и сильной связей, так и промежуточной связи.

2. Вычислен энергетический спектр двухмерной модели Хаббарда, который позволяет объяснить переход диэлектрик-металл. Исследовано влияние переноса электронов на второй по близости соседний узел решетки на энергетический спектр системы, описываемой гамильтонианом Хаббарда.

3. Вычислена энергия основного состояния двухмерной модели Хаббарда, показано, что основное состояние двухмерной модели Хаббарда является антиферромагнитным. Исследовано влияние на энергию основного состояния интеграла переноса электронов на следующий по близости узел решетки.

4. Вычисление и исследование антикоммутаторной функции Грина в рамках выбранного приближения показало, что в пределе сильных корреляций система, описываемая гамильтонианом Хаббарда, начинает приобретать черты латтинжеровской жидкости, но не сводится полностью к ней. В пределе слабой связи модель Хаббарда описывается в рамках нормальной ферми-жидкости.

5. Вычислена и исследована магнитная восприимчивость двухмерной модели Хаббарда. Получено аналитическое выражение для восприимчивости спиновых подсистем, учитывающее магнитные восприимчивости спиновых подсистем и переносы намагниченности между спиновыми подсистемами, позволяющее провести детальный анализ поведения восприимчивости в зависимости от параметров системы.

6. Вычислены характеристики наносистем в рамках модели Хаббарда. Показано, как энергетический спектр наносистемы изменяется в зависимости от количества атомов наносистемы. С учетом влияния атомов подложки вычислены значения проекций спина атомов, показано, что магнитные моменты (спины) атомов наносистемы зависят от количества атомов в наносистеме, о чем свидетельствуют эксперименты по измерению магнитных моментов атомов переходных металлов в наносистемах. Вычислены энергии

основного состояния наносистем, показано, что основное состояние наносистем является синглетным.

7. Вычислены характеристики фуллерена  $C_{60}$  и структурных элементов этого фуллерена. Показано, что в этих наносистемах происходит сильная делокализация электронов, обобществление электронов в  $C_{60}$  приводит к тому, что энергия основного состояния фуллерена  $C_{60}$  понижается по сравнению с изолированными димером, пентагоном и гексагоном.

### **Литература.**

1. Anderson P.W. The resonating valence bond state in  $La_2CuO_4$  and superconductivity// Science. – 1987. – v. 235. – N 5. – p. 1169-1198.
2. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands//Proc. R. Soc. A. -1963. - v. 276. – N 1365. – p. 238-257.
3. Зайцев Р.О. Диаграммные методы в теории сверхпроводимости и ферромагнетизма. М.: УРСС, 2004. – 175 с.
4. Lieb E.H., Wu F.Y. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension// Phys. Rev. – 1968. – v. 20. – N 25. – p. 1445-1448.
5. Takahashi M. One-dimensional Hubbard model at finite temperature// Prog. Theor. Phys. – 1971. – v. 47. – N 1. – p. 69-82.
6. Зубарев Д.Н. Двухвременные функции Грина в статистической физике// УФН. – 1960. т. 1. - № 1. – с. 71-116.
7. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985. – 263 с.
8. Изюмов Ю.А., Кацнельсон М.И., Скрыбин Ю.Н. Магнетизм коллективизированных электронов. – М.: Наука, 1994. - 364 с.
9. Mancini F., Avella A. The Hubbard model within the equations of motion approach// Advances in Physics. – 2004. – V. 53. – N. 5-6. – P. 537 – 768.
10. Нигматуллин Р.Р., Тобоев В.А. Корреляционные функции для анизотропной модели Гейзенберга в нулевом магнитном поле // ТМФ. – 1986. – Т. 68. - № 1. – С. 88 – 98.



- 11.Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 416 с.
- 12.Yang C., Kocharian A.N., Chiang Y.L. Phase transitions and exact ground-state properties of the one-dimensional Hubbard model in a magnetic field // J. Phys.: Condens. Matter. – 2000. – V. 12. – N 15. P. 7433 – 7454.
- 13.H. Hasegawa. Nonextensive thermodynamics of the two-site Hubbard model// Physica A. – 2005. – v. 351. – N 1. – p. 273-285.
- 14.Малышев С.Л., Попов В.Н. О сверхпроводимости в трехзонной двумерной модели Хаббарда с отталкиванием. //ТМФ. – 1995. т. 105. - № 1. – с. 149-162.
- 15.Кузьмин Е.В., Петраковский Г.А., Завадский Э.А. Физика магнитоупорядоченных веществ. – Новосибирск: Наука, 1976. – 278 с.
- 16.Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands III. An improved solution//Proc. R. Soc. A. -1963. - v. 281. – N 1386. – p. 401-419.
- 17.Anderson P.W. Two crucial experimental tests of the resonating valence bond – Luttinger liquid interlayer tunneling theory of high- $T_c$  superconductivity// Phys. Rev. B. – 1990. – v. 42. – N 4. – p. 2624-2626.
- 18.Haldane F.D.M. Luttinger liquid theory of one-dimensional quantum fluids: I. Properties of the Luttinger model and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas// J. Phys. C: Solid State Phys. – 1981. – v. 14. – N 9. – p. 2585-2609.
- 19.Salmhofer M. Continuous Renormalization for Fermions and Fermi Liquid Theory// Comm. Math. Phys. - 1998. - V. 194. - N 2. - P. 249-295.
- 20.Halboth C.J., Metzner W. d-wave Superconductivity and Pomeranchuk Instability in the two-dimensional Hubbard model// Phys. Rev. Lett. - 2000. - V. 85. - N 24. - P. 5162-5165.
- 21.Bulut N.  $d_{x^2-y^2}$ -wave superconductivity and the Hubbard model// Adv. Phys. – 2002. – v. 51. – N 6. – p. 1-84. (Cond-mat/ 0207186).
- 22.Arita R., Kuroki K., Aoki H. Magnetic properties of the Hubbard model on the three-dimensional lattices: fluctuation-exchange and two-particle self-consistent studies// J. Phys. Soc. Jpn. – 2000. V. 69. – N 3. - P. 785-795.

23. Sasagawa T., Mang P.K., Vajk O.P., Kapitulnik A., Greven M. Bulk magnetic properties and phase diagram of Li-doped  $\text{La}_2\text{CuO}_4$ : Common magnetic response of hole-doped  $\text{CuO}_2$  planes. // Phys. Rev. B. – 2002. – v. 66. – N 18. – p. 184512-184518.

**Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:**

1. Миронов Г.И. Приближение статических флуктуаций для модели Хаббарда/ В.В. Лоскутов, Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматуллин// ФНТ. – 1996. – Т. 22. - №. 3.- С. 282-286.
2. Миронов Г.И. Антиферромагнетизм в модели Хаббарда/ Г.И.Миронов// ФТТ. – 1997. – Т. 39. - №. 3.- С. 1594-1599.
3. Миронов Г.И.  $B-B'-U$  модель Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов// ФТТ. – 1999. – Т. 41. - №. 6.- С. 951-956.
4. Миронов Г.И. Одночастичная функция Грина в  $B-B'-U$  модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов // Тезисы докладов XXX Международной Зимней школы физиков-теоретиков "Коуровка-2004, Екатеринбург – Челябинск. – 2004. – С. 191.
5. Миронов Г.И. Исследование одночастичной функции Грина в бипартитной модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов// ФНТ. – 2005. – Т. 31. - №. 12.- С. 1388-1394.
6. Миронов Г.И. Энергия основного состояния в  $B-B'-U$  модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов// ФТТ. – 2002. – Т. 44. - №. 2.- С. 209-214.
7. Миронов Г.И. Релаксация локализованных спинов в металлах при низких температурах/ А.А. Косов, Г.И. Миронов// ФТТ. – 1982. – Т. 24. - №. 2.- С. 583-585.
8. Миронов Г.И. Спиновая релаксация электронов проводимости в разбавленных магнитных сплавах при низких температурах/ Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев// ФНТ. – 1987. – Т. 12. - №. 3.- С. 271-273.

9. Миронов Г.И. Кондовские аномалии в электронном парамагнитном резонансе в разбавленных магнитных сплавах/ Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев// ФНТ. – 1988. – Т. 14. - №. 9.- С. 950-959.
10. Миронов Г.И. Теория электронного парамагнитного резонанса в металлах с магнитными примесями/ Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев// Парамагнитный резонанс – Издательство КГУ, Казань, 1990. Вып. 23. – С. 56-106.
11. Mironov G.I. Nuclear magnetic resonance in dilute magnetic alloys and superconductors/ G.I. Mironov, N.G. Fazleev, J.L. Fry// Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 1992. V. 108. – N 1-3. - P. 123-124.
12. Mironov G.I. Spin dynamic properties of Kondo system/ G.I. Mironov, N.G. Fazleev// Physica B: Physics of Cond. Matter. – 1991. V. 169. – N 1-4. - P. 475-476.
13. Mironov G.I. Spin Dynamics in  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  probed by ESR/ G.I. Mironov, V. Ivanshin// Physica B: Physics of Cond. Matter. – 2005. V. 359. – N 1. - P. 47-49.
14. Миронов Г.И. Магнитная восприимчивость двухмерной двухподрешеточной модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов// ФТТ. – 2005. – Т. 47. - №. 6.- С. 1075-1081.
15. Mironov G.I. Susceptibility in the Hubbard Model in the Static-Fluctuation Approximation/ G.I. Mironov// Journal of Superconductivity. – 2006. – V. 19. – N. 6. – P. 333-339.
16. Миронов Г.И. Вычисление магнитной восприимчивости двухмерной бипартитной модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов, Р.Р. Нигматуллин// Тезисы докладов XXX Международной Зимней школы физиков-теоретиков "Коуровка-2004, Екатеринбург – Челябинск. – 2004. – С. 190.
17. Mironov G.I. Susceptibility in the Hubbard model in the Static-fluctuation approximation/ G.I. Mironov//Abstracts International Conference Nanores-2004, Kazan. – 2004. – P.115.
18. Миронов Г.И. Решение B-U-V модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/Г.И. Миронов // Сборник статей "Актуальные проблемы физики конденсированных сред" – Казань, 2004. – С. 235-257.

19. Миронов Г.И. Молекула водорода в модели Хаббарда/Г.И. Миронов// Сборник статей X Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" –Йошкар-Ола–Казань–Москва, 2003. – Ч.1. - С. 323-326.
20. Mironov G.I. The investigation of the  $B-U-V$  Hubbard model in the static-fluctuation approximation/ G.I. Mironov//MRSej. – 2004. – V. 6. – N.1. – P.141-153.
21. Миронов Г.И. Молекула водорода в модели Хаббарда с учетом парных перескоков/Г.И. Миронов // Сборник статей XI Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" – Москва, 2004.– Ч.1.-С.116-119.
22. Миронов Г.И. Молекула водорода в модели Хаббарда с учетом парных перескоков/ Г.И. Миронов, В.А. Воробьева, В.А. Чендемеров// Сборник тезисов "Структура и динамика молекулярных систем", Йошкар-Ола – Москва – Казань – Уфа. – 2004. – С. 176.
23. Миронов Г.И. Наноструктуры в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов // Тезисы докладов XXXI Международной Зимней школы физиков-теоретиков "Коуровка-2006, Екатеринбург – Челябинск. – 2006. – С. 31-32.
24. Миронов Г.И. Магнитные моменты атомов в нанокластерах/ Г.И. Миронов // Тезисы докладов XXXI Международной Зимней школы физиков-теоретиков "Коуровка-2006, Екатеринбург – Челябинск. – 2006. – С. 32-33.
25. Миронов Г.И. Молекула водорода в модели Хаббарда/ Г.И. Миронов, А.В. Силантьев// Сборник тезисов "Структура и динамика молекулярных систем", Йошкар-Ола – Москва – Казань – Уфа. – 2003. – С. 230.
26. Миронов Г.И. Двухатомный нанокластер в магнитном поле в модели Хаббарда// Г.И. Миронов// Сборник тезисов "Структура и динамика молекулярных систем", Йошкар-Ола – Москва – Казань – Уфа. – 2005. – С. 135.
27. Миронов Г.И. Описание наномagnetизма в рамках модели Хаббарда// Г.И. Миронов // Сборник тезисов "Структура и динамика молекулярных систем", Йошкар-Ола – Москва – Казань – Уфа. – 2006. – С. 153.
28. Mironov G.I. The investigation of transition-metal nanoclusters in the Hubbard Model in the static-fluctuation approximation/ G.I. Mironov// Book of abstracts of

International Symposium "Nuclear Magnetic Resonance in Condensed Matter", Saint Peterburg. – 2006. – P. 38.

29. Миронов Г.И. Наносистемы в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов//ФТТ. – 2006. –Т.48.- №.7.-С.1299-1306.

30. Миронов Г.И. Вычисление функций Грина для наноструктур в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов// ФММ. – 2006. – Т. 102. - №. 6.- С. 611-620.

31. Миронов Г.И. Исследование структурных элементов фуллерена в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов// ФТТ. – 2007. – Т. 49. - №. 3.- С. 527-534.

32. Миронов Г.И. Исследование фуллерена  $C_{60}$  в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций// Г.И. Миронов // Сборник тезисов "Структура и динамика молекулярных систем", Йошкар-Ола – Москва – Казань – Уфа. – 2006. – С. 152.

33. Миронов Г.И. Устойчивость атомарных циклических структур тиа  $C_6H_6$ // Г.И. Миронов, Э.Д. Изергин// Сборник тезисов "Структура и динамика молекулярных систем", Йошкар-Ола – Москва – Казань – Уфа. – 2006. – С. 103.

34. Mironov G.I. Fullerenes  $C_{60}$  in the Hubbard Model/ G.I. Mironov// Book of abstracts of International Symposium "Nuclear Magnetic Resonance in Condensed Matter", Saint Peterburg. – 2006. – P. 39.

35. Миронов Г.И. Антиферромагнитное упорядочение в модели Хаббарда/Г.И. Миронов, В.В. Лоскутов// Сборник статей IV Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" – Йошкар-Ола-Казань-Москва, 1997. – Ч.4. - С. 64-67.

36. Миронов Г.И. Внутренняя энергия и теплоемкость модели Хаббарда/Г.И. Миронов, В.В. Лоскутов// Сборник статей V Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" – Йошкар-Ола-Казань-Москва, 1998. – Ч.3. - С. 123-126.

37. Миронов Г.И. Энергия основного состояния модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/Г.И. Миронов, В.В. Лоскутов// Труды

молодежной научной школы "Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений" – Казань, 1998. С. 93-94.

38. Миронов Г.И. Модель Хаббарда с учетом межузельного взаимодействия/ Г.И. Миронов, А.И. Андреев// Труды молодежной научной школы "Актуальные проблемы магнитного резонанса и его приложений" – Казань, 1998. С. 61-62.

39. Миронов Г.И. Вычисление энергии основного состояния нанокластеров в модели Хаббарда/Г.И. Миронов // Сборник статей XII Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" – Уфа-Йошкар-Ола-Казань-Москва, 2005. – Ч.2. - С. 42-45.

40. Миронов Г.И. Функции Грина и энергетический спектр для нанокластеров в модели Хаббарда/Г.И. Миронов // Сборник статей XII Всероссийской конференции "Структура и динамика молекулярных систем" – Йошкар-Ола-Казань-Москва, 2005. – Ч.2. - С. 46-49.

41. Миронов Г.И. Вычисление функции Грина фуллерена  $C_{60}$  в модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/Г.И. Миронов// Структура и динамика молекулярных систем: Сб. статей. Вып. 13, Ч. 2. – Уфа: ИФМК УНЦ РАН, 2006. С. 40-45.

42. Миронов Г.И. Наномагнетизм в рамках модели Хаббарда /Г.И. Миронов// Структура и динамика молекулярных систем: Сб. статей. Вып. 13, Ч. 2. – Уфа: ИФМК УНЦ РАН, 2006. С. 46-49.

43. Миронов Г.И. Энергетический спектр фуллерена  $C_{24}$  /Г.И. Миронов, Э.Д. Изергин// Структура и динамика молекулярных систем: Сб. статей. Вып. 13, Ч. 1. – Уфа: ИФМК УНЦ РАН, 2006. С. 367-370.

44. Миронов Г.И. Релаксация ядерных спинов в разбавленных магнитных сплавах/ Г.И. Миронов// Вестник МГПИ им. Н.К. Крупской, Йошкар-Ола. – 2004. – С. 24-29.

45. Миронов Г.И. Диаграммный анализ динамики локализованных моментов в разбавленных магнитных сплавах при низких температурах/ Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев// Радиоспектроскопия: межвузовский сборник научных трудов под ред. И.Г. Шапошникова, Пермь. – 1988. – С. 37-45.

46. Миронов Г.И. Динамический отклик электронов проводимости в металлах при низких температурах/ Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев// Радиоспектроскопия: межвузовский сборник научных трудов под ред. И.Г. Шапошникова, Пермь. – 1988. – С. 46-47.
47. Mironov G.I. The Kondo effect in the spin dynamics of localized moments in dilute magnetic alloys / G.I. Mironov, N.G. Fazleev// Abstracts 24<sup>th</sup> Congress AMPERE on Magnetic Resonance and Related Phenomena, Poznan.–1988. – P.C66.
48. Миронов Г.И. Кондовские аномалии в спиновой динамике локализованных моментов в разбавленных магнитных сплавах/ Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев// Тезисы докладов Всесоюзной конференции по физике магнитных явлений, Калинин, - 1988. – С. 415 – 416.
49. Mironov G.I. Kondo anomalies in electron paramagnetic resonance in dilute magnetic alloys / G.I. Mironov, N.G. Fazleev// Abstracts 9<sup>th</sup> AMPERE summer school, Novosibirsk. – 1987. – P. 168.
50. Mironov G.I. Spin Dynamics in  $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  probed by ESR/ G.I. Mironov, V. Ivanshin//Abstracts International Conference SCES'04, Karlsruhe, Germany. – 2004. –P. 76.
51. Миронов Г.И. Эффект Кондо в динамике локализованных моментов в разбавленных магнитных сплавах/ Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев// Радиоспектроскопия: межвузовский сборник научных трудов под ред. И.Г. Шапошникова, Пермь. – 1989. – С. 14-19.
52. Миронов Г.И. Теория магнитного резонанса на ядрах парамагнитных ионов в разбавленных магнитных сплавах/ Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев// Тезисы докладов 3 Всесоюзного совещания по ядерно-спектроскопическим исследованиям сверхтонких взаимодействий, Алма-Ата, - 1989. – С. 40.
53. Миронов Г.И. Спиновая динамика в разбавленных кондо-системах при низких температурах/ Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев// Тезисы докладов 24 Всесоюзного совещания по физике низких температур, Донецк, - 1990. – Часть 2. С. 269 - 270.

54. Миронов Г.И. Эффект Кондо в металлах с магнитными примесями/ Г.И. Миронов, Н.Г. Фазлеев// Радиоспектроскопия: межвузовский сборник научных трудов под ред. И.Г. Шапошникова, Пермь. – 1990. – С. 10-14.
55. Mironov G.I. Ferromagnetism in Hubbard model/ G.I. Mironov, R.R. Nigmatullin// Abstracts 27<sup>th</sup> Congress AMPERE on Magnetic Resonance and Related Phenomena, Kazan. – 1994. – V. 2. – P. 365-366.
56. Миронов Г.И. Основное состояние и спектр двухподрешеточной модели Хаббарда/ Г.И. Миронов// Тезисы Вавиловских чтений, Йошкар-Ола. – 1996. – С. 485-486.
57. Миронов Г.И. Об одном методе решения систем дифференциальных уравнений, возникающих при решении некоторых задач квантовой статистики// Г.И. Миронов, И.Б. Барский// Тезисы международной научной конференции "Дифференциальные уравнения. Интегральные уравнения. Специальные функции", Самара. – 1997. – С. 102.
58. Миронов Г.И. О решении систем нелинейных дифференциальных уравнений в модели Хаббарда/ Г.И. Миронов, И.Б. Барский// Тезисы докладов 3 Сибирского Конгресса по прикладной и индустриальной математике, Новосибирск. – 1998. – С. 4-5.
59. Миронов Г.И. Поперечная динамическая восприимчивость модели Хаббарда в приближении статических флуктуаций/ Г.И. Миронов, А.Н. Белорусов, Э.Д. Изергин// Сборник тезисов "Структура и динамика молекулярных систем", Йошкар-Ола – Москва – Казань – Уфа. – 2004. – С. 175.
60. Миронов Г.И. Энергетический спектр фуллерена  $C_{24}$ / Г.И. Миронов, Э.Д. Изергин// Сборник тезисов "Структура и динамика молекулярных систем", Йошкар-Ола – Москва – Казань – Уфа. – 2006. – С. 104.
61. Миронов Г.И. Устойчивость атомарных циклических структур типа  $C_6H_6$  /Г.И. Миронов, Э.Д. Изергин// Структура и динамика молекулярных систем: Сб. статей. Вып. 13, Ч. 1. – Уфа: ИФМК УНЦ РАН, 2006. - С. 364-366.
62. Миронов Г.И. Исследование фуллерена  $Au_{16}$  в модели Хаббарда / Г.И. Миронов// ФТТ. – 2008. – Т. 50. - №. 1.- С. 182-187.